

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده علوم

پایان نامه کارشناسی ارشد در رشته شیمی (شیمی فیزیک)

تعیین خواص ترمودینامیکی سیالات کوانتومی و جمع پذیر
با استفاده از معادله حالت تائو و میسون

توسط

الهام حسینی باب اناری

استاد راهنما

دکتر جلیل مقدسی

دکتر محمد مهدی پاپری

دی ماه ۱۳۸۷

۱۳۸۸ / ۳ / ۱۷

کتابخانه تخصصی مرکز علمی
شهر شاهرز

۱۱۳۳۵۰

به نام خدا

اظهار نامه

اینجانب الهام حسینی باب اناری (۸۵۰۸۰۷) دانشجوی رشته ی شیمی گرایش شیمی فیزیک دانشکده ی علوم اظهار می کنم که این پایان نامه حاصل پژوهش خودم بوده و در جاهایی که از منابع دیگران استفاده کرده ام، نشانی دقیق و مشخصات کامل آن را نوشته ام. همچنین اظهار می کنم که تحقیق و موضوع پایان نامه ام تکراری نیست و یا در اختیار غیر قرار ندهم. کلیه حقوق این اثر مطابق با آیین نامه مالکیت فکری و معنوی متعلق به دانشگاه شیراز است.

نام و نام خانوادگی : الهام حسینی باب اناری

تاریخ و امضا : ۸۸/۲/۱۲

به نام خدا

تعیین خواص ترمودینامیکی سیالات جمع پذیر و کوانتومی با استفاده از معادله حالت
تائو و میسون

به وسیله ی:
الهام حسینی باب اناری

پایان نامه
ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه به عنوان بخشی از فعالیت های تحصیلی لازم برای اخذ
درجه کارشناسی ارشد

در رشته ی:
شیمی (شیمی فیزیک)

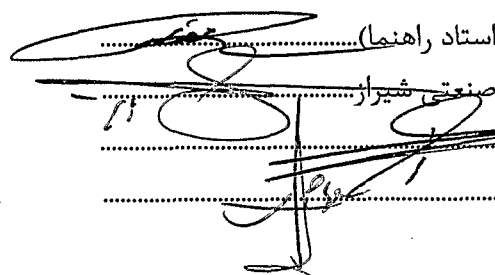
از دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی و تصویب شده توسط کمیته پایان نامه با درجه:

دکتر جلیل مقدسی، استاد بخش شیمی (رئیس کمیته و استاد راهنما).....
دکتر محمد مهدی پاپری، استادیار بخش شیمی دانشگاه صنعتی شیراز.....
دکتر سید حسین موسوی پور، دانشیار بخش شیمی.....
دکتر افشان مهاجری، دانشیار بخش شیمی.....



دی ماه ۱۳۸۷

تقدیم:

- به پدر و مادر عزیزم که نخستین الفبای زندگی را به من آموختند و با زحمات بی دریغ خود مرا در نیل به هدفم یاری رساندند.
- به بهترین دوست زندگی‌م، همسر عزیزم که همواره با دلگرمی و تشویق‌های گام‌های مرا جهت پیمودن مراحل دشوار استوار ساخت.
- و تقدیم به همه کسانی که یادشان و وجودشان مایه دلگرمی من است.

سپاسگزاری

حمد و سپاس خداوند یکتا را، که توفیق بندگی و عبادت به ما ارزانی داشت. در ابتدا با تشکر فراوان از استاد بزرگوار جناب آقای دکتر مقدسی که مسئولیت استاد راهنمایی مرا پذیرفتند.

خود را مرهون زحمات و راهنماییهای بی بدیل جناب آقای دکتر پاپری میدانم، چرا که علاوه بر نقش اساسی ایشان در تحقق این پژوهش، در دوره کارشناسی نیز مشمول راهنماییهای سخاوتمندانه ایشان بوده ام.

از اساتید گرانقدر سرکار خانم دکتر مهاجری و جناب آقای دکتر موسوی پور که با راهنمایی های خود مرا هدایت نمودند، کمال تشکر را دارم.

در پایان لازم می دانم از زحمات کلیه اساتید بزرگوار که در تمام مقاطع تحصیلی از محضر آنها کسب فیض نمودم و همچنین از زحمات کلیه پرسنل اعم از اساتید و کارمندان دانشگاه صنعتی شیراز که بی دریغ یاری رسان بنده بوده اند، تشکر و قدردانی نمایم.

چکیده

تعیین خواص ترمودینامیکی سیالات کوانتومی و جمع پذیر با استفاده از معادله حالت

تائو و میسون

به وسیله ی :

الهام حسینی باب اناری

به طور کلی می توان خواص ترمودینامیکی سیالات را با استفاده از یک معادله حالت پیشگویی نمود. از بین تمامی معادلات حالتی که به وسیله محققان مختلف پیشنهاد شده است، ما معادله حالت تائو و میسون (TM) را انتخاب کرده ایم. در این تحقیق، با استفاده از معادله حالت TM خواص سیالات کوانتومی و جمع پذیر که شامل آب، آمونیاک، متانول، اتانول، هلیوم، نئون، هیدروژن و متان مورد مطالعه قرار گرفته است. سه پارامتر B_2 (ضریب دوم ویریال) α و b (دو پارامتری که فقط به نیروی دافعه مولکولی وابسته اند) مورد نیاز برای معادله حالت، با استفاده از رابطه ای که توسط Meng-Duan ارائه شده بود، مورد استفاده قرار گرفت.

محاسبات انجام شده ناحیه وسیعی از بخار (گاز) تا محدوده فوق بحرانی و مایعات متراکم را پوشش می دهد. خصوصیات ترمودینامیکی محاسبه شده شامل دانسیته، آنتالپی، آنتروپی، ظرفیت گرمایی در فشار و حجم ثابت، سرعت صوت و ضریب ژول- تامسون می باشد.

محاسبات انجام شده در این تحقیق نشان می دهد که معادله تصحیح شده تائو و میسون قادر به پیشگویی خواص ترمودینامیکی سیالات کوانتومی و جمع پذیر با یک صحت مطلوب می باشد. دقت به دست آمده از محاسبات ما برای چگالی ۱- ۱/۵٪، آنتالپی ۲- ۴٪، آنتروپی ۳- ۵٪، ظرفیت گرمایی ۴- ۷٪، سرعت صوت ۶- ۷٪ است. توافق خوب بین مقادیر پیش بینی شده و مقادیر تجربی، قدرت پیش گویی این معادله حالت را نشان می دهد.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول : مقدمه
۴	فصل دوم : معادلات حالت
۶	۱-۲- معادلات حالت تجربی
۶	۱-۱-۲- Beattie-Bridgeman حالت معادله
۷	۲-۱-۲- Benedict-Webb-Rubin حالت معادله
۷	۳-۱-۲- Tait حالت معادله
۸	۴-۱-۲- Murnaghan حالت معادله
۹	۲-۲- معادلات حالت نیمه تجربی
۹	۱-۲-۲- Van der walls حالت معادله
۱۰	۲-۲-۲- Redlich-Kwong(RK) حالت معادله
۱۰	۳-۲-۲- Soave-Redlich-Kwong(SRK) حالت معادله
۱۱	۴-۲-۲- Peng-Robinson(PR) حالت معادله
۱۲	۵-۲-۲- Fuller حالت معادله
۱۲	۳-۲- معادلات حالت نظری
۱۳	۱-۳-۲- Virial حالت معادله
۱۴	۲-۳-۲- روشهای تعیین ضریب دوم ویریا
۱۴	۱-۲-۳-۲- استفاده از قانون حالات متناظر
۱۶	۲-۲-۳-۲- تعیین B_2 با استفاده از پتانسیل بین مولکولی
۱۷	۳-۲-۳-۲- نقش نیروی جاذبه و دافعه در ساختار سیال متراکم
۱۸	۴-۲-۳-۲- تئوری اختلال
۲۰	۵-۲-۳-۲- تئوری اختلال Weeks-chandler-Anderson (WCA)
۲۱	۳-۳-۲- Carnhan and starling حالت معادله

صفحه	عنوان
۲۱	۲-۳-۴- معادله حالت CSRK
۲۲	۲-۳-۵- معادله حالت CF
۲۲	۲-۳-۶- معادله حالت Song-Mason(SM)
۲۶	۲-۳-۷- معادله حالت Ihm-Song-Mason(ISM)
۲۷	۲-۳-۸- معادله حالت Tao-Mason(TM)
۳۲	فصل سوم : خصوصیات ترمودینامیکی
۳۳	۳-۱-۱- خصوصیات ترمودینامیکی و تصحیح پارامترها
۳۳	۳-۱-۱-۱- تصحیح ضریب دوم ویريال
۳۶	۳-۱-۱-۲- تصحیح پارامترهای α و b
۳۷	۳-۱-۱-۳- تصحیح پارامتر λ
۳۷	۳-۲-۱- خصوصیات ترمودینامیکی
۳۷	۳-۲-۱-۱- آنتالپی
۳۸	۳-۲-۱-۲- تغییر آنتالپی تغییر فاز
۳۸	۳-۳-۱- خواص باقیمانده (Residual properties)
۴۲	۳-۳-۱-۱- خواص باقیمانده با استفاده از معادله حالت
۴۳	۳-۳-۱-۲- خواص باقیمانده برای معادله حالت TM
۴۴	۳-۴-۱- روابطی برای تعیین خصوصیات ترمودینامیکی گازها
۴۷	۳-۴-۱-۱- ظرفیت گرمایی
۴۷	۳-۴-۱-۱-۱- ظرفیت گرمایی جامدات
۴۷	۳-۴-۱-۱-۲- ظرفیت گرمایی مایعات
۴۸	۳-۴-۱-۲- خواص ترمودینامیکی بدست آمده از سرعت صوت
۴۸	۳-۴-۱-۲-۱- سرعت صوت
۴۹	۳-۴-۱-۳- ضریب ژول - تامسون
۵۱	۳-۵-۱- ارزیابی مسیرهای رسیدن به خواص ترمودینامیکی
۵۷	فصل چهارم : بحث و نتیجه گیری
۵۸	۴-۱-۱- نحوه پیش بینی خصوصیات ترمودینامیکی توسط معادله حالت TM

صفحه	عنوان
۵۹	۲-۴- ایزوترم $P-V$
۵۹	۳-۴- آنتالپی
۵۹	۴-۴- آنتروپی
۶۰	۵-۴- ظرفیت گرمایی
۶۰	۶-۴- سرعت صوت
۶۱	۷-۴- ضریب ژول- تامسون
۶۱	۸-۴- میزان انحراف و AAD
۹۵	فهرست منابع
۹۹	چکیده

فهرست جداول

صفحه	عنوان و شماره
۵۵	جدول (۱-۱-۳) اطلاعات مورد استفاده برای ترکیبات مورد نظر
۵۵	جدول (۲-۱-۳) ضرایب مورد استفاده در پارامتر α
۵۵	جدول (۳-۱-۳) ضرایب مورد استفاده در پارامتر b
۵۶	جدول (۴-۱-۳) ضرایب مربوط به پارامتر λ
۶۲	جدول (۱-۱-۴) میانگین انحراف "AAD" مقادیر محاسبه شده نسبت به مقادیر تجربی در حالت مایع در فشار و دماهای مختلف
۶۳	جدول (۲-۱-۴) میانگین انحراف "AAD" مقادیر محاسبه شده نسبت به مقادیر تجربی در حالت فوق بحرانی در فشار و دماهای مختلف
۶۴	جدول (۳-۱-۴) میانگین انحراف "AAD" مقادیر محاسبه شده نسبت به مقادیر تجربی در حالت بخار در فشار و دماهای مختلف
۶۴	جدول (۴-۱-۴) میانگین انحراف "AAD" مقادیر محاسبه شده نسبت به مقادیر تجربی در حالت بخار در فشار و دماهای مختلف
۶۵	جدول (۱-۱-۴) میانگین انحراف "AAD" مقادیر محاسبه شده نسبت به مقادیر تجربی در ناحیه دو فازی در حالت مایع در فشار و دماهای مختلف
۶۶	جدول (۵-۱-۴) میانگین انحراف "AAD" مقادیر محاسبه شده نسبت به مقادیر تجربی در ناحیه دو فازی در حالت بخار در فشار و دماهای مختلف

فهرست نمودارها

صفحه	عنوان و شماره
۶۷	نمودار (۱-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی سیالات جمع پذیر در حالت مایع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۶۷	نمودار (۲-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی سیالات جمع پذیر در حالت فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۶۸	نمودار (۳-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی سیالات جمع پذیر در حالت در حالت بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۶۸	نمودار (۴-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی سیالات کوانتومی در حالت مایع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۶۹	نمودار (۵-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی سیالات کوانتومی در حالت فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۶۹	نمودار (۶-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی سیالات کوانتومی در حالت بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۷۰	نمودار (۷-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی آمونیاک در ناحیه اشباع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۷۰	نمودار (۸-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی اتانول در ناحیه اشباع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۷۱	نمودار (۹-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی هیدروژن در ناحیه اشباع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۷۱	نمودار (۱۰-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی متان در ناحیه اشباع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۷۲	نمودار (۱۱-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی متانول در ناحیه اشباع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
۷۲	نمودار (۱۲-۲-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی آب در ناحیه دو فازی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف

- نمودار (۴-۲-۱۳) انحراف مقادیر محاسبه شده چگالی نئون در ناحیه دو فازی
- نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۳-۱) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتالپی سیالات جمع پذیر در حالت
- فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۳-۲) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتالپی سیالات جمع پذیر در حالت
- بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۳-۳) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتالپی سیالات کوانتومی در حالت
- مایع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۳-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتالپی سیالات کوانتومی در حالت
- فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۳-۵) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتالپی سیالات کوانتومی در حالت
- بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۳-۶) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتالپی آمونیاک در ناحیه اشباع
- (بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۳-۷) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتالپی متان در ناحیه اشباع
- (بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۴-۱) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتروپی سیالات جمع پذیر در حالت
- فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۴-۲) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتروپی سیالات جمع پذیر در
- حالت بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۴-۳) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتروپی سیالات کوانتومی در
- حالت مایع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۴-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتروپی سیالات کوانتومی در حالت
- فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۴-۵) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتروپی سیالات کوانتومی در حالت
- بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۴-۶) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتروپی آمونیاک در ناحیه اشباع
- (بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
- نمودار (۴-۴-۷) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتروپی متان در ناحیه اشباع
- (بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف

صفحه	عنوان و شماره
	نمودار (۴-۴-۸) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتروپی نئون در ناحیه اشباع
۸۰	نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۴-۹) انحراف مقادیر محاسبه شده آنتروپی آب در ناحیه اشباع
۸۱	(بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۱) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات جمع پذیر در حالت
۸۱	فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۲) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات جمع پذیر
۸۲	در حالت بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۳) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات کوانتومی
۸۲	در حالت مایع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات کوانتومی
۸۳	در حالت مایع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۵) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات کوانتومی
۸۳	در حالت بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۶) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات جمع پذیر
۸۴	بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۷) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات جمع پذیر
۸۴	بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۸) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات کوانتومی
۸۵	در حالت مایع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۹) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات کوانتومی
۸۵	در حالت فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۵-۱۰) انحراف مقادیر محاسبه شده ظرفیت گرمایی سیالات کوانتومی
۸۶	در حالت بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۶-۱) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت سیالات جمع پذیر
۸۶	در حالت فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۶-۲) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت سیالات جمع پذیر
۸۷	در حالت بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف نمودار (۴-۶-۳) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت سیالات کوانتومی در
۸۷	حالت فوق بحرانی نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف

صفحه	عنوان و شماره
	نمودار(۴-۶-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت سیالات کوانتومی در
۸۸	حالت مایع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۶-۵) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت سیالات کوانتومی در
۸۸	حالت بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۶-۶) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت آمونیاک در ناحیه اشباع (بخار)
۸۹	نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۶-۷) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت هیدروژن در ناحیه
۸۹	اشباع (بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۶-۸) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت متان در ناحیه
۹۰	اشباع (بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۶-۹) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت متانول در ناحیه
۹۰	اشباع(بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۶-۱۰) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت نئون در ناحیه
۹۱	اشباع نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۶-۱۱) انحراف مقادیر محاسبه شده سرعت صوت آب در ناحیه اشباع
۹۱	(بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۷-۱) انحراف مقادیر محاسبه شده ضریب ژول- تامسون سیالات جمع پذیر
۹۲	در فاز بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۷-۲) انحراف مقادیر محاسبه شده ضریب ژول- تامسون سیالات کوانتومی
۹۲	در فاز بخار نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۷-۳) انحراف مقادیر محاسبه شده ضریب ژول- تامسون آمونیاک در
۹۳	ناحیه اشباع (بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۷-۴) انحراف مقادیر محاسبه شده ضریب ژول- تامسون هیدروژن در
۹۳	ناحیه اشباع (بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۷-۵) انحراف مقادیر محاسبه شده ضریب ژول- تامسون متان در ناحیه
۹۴	اشباع(بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف
	نمودار(۴-۷-۶) انحراف مقادیر محاسبه شده ضریب ژول- تامسون نئون در ناحیه
۹۴	اشباع (بخار) نسبت به مقادیر تجربی در دماها و فشارهای مختلف

فهرست نشانه های اختصاری

- ۱- A_1 = تابعی از پارامترهای ساختاری (فاکتور شکل)
۲- A_2 = تابعی از پارامترهای ساختاری (فاکتور شکل)
۳- B = ضریب کشیدگی
۴- B_2 = ضریب دوم ویریا
۵- $b(T)$ = پارامتر وابسته به دما
۶- C_p = ظرفیت گرمایی در فشار ثابت
۷- C_v = ظرفیت گرمایی در حجم ثابت
۸- G = انرژی آزاد گیبس
۹- H = آنتالپی
۱۰- h = ثابت پلانک
۱۱- k_B = ثابت بولتزمن
۱۲- k = تابعی از پارامترهای ساختاری (فاکتور شکل)
۱۳- m = جرم مولکولی، kg
۱۴- N = عدد آووگادرو
۱۵- P = فشار، bar
۱۶- P_c = فشار بحرانی، bar
۱۷- P_r = فشار کاهش یافته، بدون بعد
۱۸- S = آنتروپی
۱۹- T = دما، K
۲۰- T_c = دمای بحرانی، K
۲۱- T_r = دمای کاهش یافته، بدون بعد
۲۲- $U(r)$ = پتانسیل
۲۳- $U_0(r)$ = پتانسیل اولیه
۲۴- V = حجم، l/mole
۲۵- V_c = حجم بحرانی، l/mole
۲۶- Z = فاکتور تراکم پذیری

حروف یونانی

$$۱- \alpha(T) = \text{پارامتر وابسته به دما}$$

$$۲- \rho = \text{چگالی}$$

$$۳- \varepsilon = \text{پارامتر پتانسیل بین مولکولی}$$

$$۴- \lambda = \text{پارامتر آزاد}$$

$$۵- \sigma = \text{پارامتر پتانسیل بین مولکولی}$$

$$۶- \omega = \text{فاکتور شکل}$$

$$۷- \mu_r = \text{ممان دو قطبی کاهش یافته}$$

$$۸- v(T_r) = \text{تابع چند جمله ای وابسته به دما}$$

$$۹- \Lambda^* = \text{طول موج دوبروی کاهش یافته}$$

$$۱۰- \gamma = \text{کشش سطحی}$$

فصل اول

مقدمه

فصل اول

مقدمه

خواص ترمودینامیکی سیالات از عمده مسائل با اهمیتی است که دارای کاربردهای علمی، مهندسی و صنعتی فراوان می باشد. دقت مورد نیاز برای تعیین خصوصیات ترمودینامیکی سیالات خالص یا مخلوط توسط استفاده کنندگان سیالات مختلف تعیین می شود.

از طریق اطلاعات تجربی هرگز نمی توان در همه محدوده های فشاری و دمایی مختلف و بالاخص برای همه مواد جهت دستیابی به خصوصیات ترمودینامیکی اقدام نمود. بنابراین به نظر می رسد که روشهایی جهت پیشگویی خصوصیات ترمودینامیکی مورد نیاز است. در کل، خصوصیات ترمودینامیکی و فیزیکی مثل آنتالپی، آنتروپی و دانسیته سیالات توسط معادله حالت قابل تخمین و پیشگویی است. البته باید در نظر داشت که، معادله حالت مورد استفاده باید از صحت و سادگی خوبی جهت پیشگویی خواص ترمودینامیکی برخوردار باشد، از طرفی بتواند خصوصیات ترمودینامیکی را در محدوده وسیعی از دما و فشار پیشگویی کند.

معادله حالت یک گاز رابطه ریاضی بین فشار، حجم، دما و تعداد ملکولهای سیال در حال تعادل می باشد که از طریق آن می توان به پیش بینی دقیقی از خواص سیالات دست یافت. برای تعیین خواص ترمودینامیکی سیستم وجود معادله حالت ضروری می باشد. در واقع با استفاده از معادله حالت می توان داده های بخار - مایع، تعادل فازی در مخلوطها و نیز خواص ترمودینامیکی سیستم را به دست آورد. ارائه معادله حالت نه تنها از جهت فرایندهای صنعتی، بلکه از دیدگاه علمی نیز مورد توجه محققان می باشد. زیرا از طریق آن می توان به پارامترهای خرد^۱ هم پی برد. در صورتی که یک معادله حالت بتواند خواص کلان^۲ را به خوبی پیش بینی نماید، می توان از آن برای به دست آوردن اطلاعات خرد مثل شکل پتانسیل موجود در سیستم استفاده نمود.

درحقیقت معادله حالت یک رابطه ریاضی است که بین خواص یک ماده خالص و یا مخلوط بوسیله روابط تجربی و یا نیمه تجربی ارتباط برقرار می سازد. منظور از خواص، هر مشخصه قابل اندازه گیری یک ماده مثل فشار، حجم، دما و یا مشخصاتی است که می توانند محاسبه و یا استنتاج شوند.

1- microscopic
2- macroscopic

به هر حال هدف هر معادله ی حالتی رسیدن به پیشگویی بهتر برای تعیین خواص ترمودینامیکی مواد مختلف می باشد. لازم به توضیح است که بر اساس آزمایشات متعددی که بر روی گازها انجام شده مشخص گردیده است که فشار، حجم، دما و مقدار گاز در فشارهای پایین توسط رابطه زیر به هم مربوط می شوند:

$$PV = nRT \quad (1-1)$$

که ثابت گاز R^3 برای همه گازها یکسان است و n نشان دهنده تعداد مولها است. معادلات حالتی که امروزه مورد استفاده قرار می گیرد، بر پایه معادله حالت فوق می باشد که البته با اضافه کردن ضرایب تصحیح و پارامترهایی به آن علاوه بر بهبود نتایج، معادلات حالت جدیدی نیز به وجود آمده است.

در این مطالعه، با استفاده از معادله حالت تائو- میسون^۴ (TM) که بر پایه مکانیک آماری استوار است، خواصی همچون چگالی، آنتالپی، آنتروپی، ظرفیت گرمایی در حجم و فشار ثابت و... را برای سیالات کوانتومی و جمع پذیر^۵، مورد بررسی قرار خواهیم داد. البته لازم به ذکر است ما در حال حاضر با ایجاد تغییراتی بر روی معادله حالت TM آن را برای سیالات مورد نظر قابل استفاده کردیم.

بهتر است ابتدا تعریفی کلی راجع به سیالات جمع پذیر و کوانتومی داشته باشیم. سیالات جمع پذیر در واقع سیالاتی هستند، که با داشتن اتمی نظیر هیدروژن و نیز اتمهای با الکتروننگاتیویته بالا مانند اکسیژن و نیتروژن، تمایل به داشتن پیوند هیدروژنی دارند. به دلیل وجود پیوند هیدروژنی در این سیالات تمایل به مجتمع شدن و تشکیل دimer در آنها وجود دارد، بنابراین نیاز به ارائه ضریب دوم ویرال خاصی برای آنها مشاهده می شود.

سیالات کوانتومی، سیالاتی هستند که با داشتن جرم مولکولی کم در دماهای پایین از خود خصوصیات ویژه ای مانند تونل زدن^۶ بروز می دهند. بنابراین مکانیک کلاسیک قادر به توصیف خصوصیات این سیالات نخواهد بود. برای توصیف ویژگی آنها باید از مکانیک کوانتومی استفاده کرد. لذا عبارتی که ضریب دوم ویرال را برای سیستمهای کلاسیکی تعریف می کند، در مورد سیستمهای کوانتومی کاربرد ندارد، پس نیاز به تعریف ضریب دوم ویرالی داریم که مختص سیستمهای کوانتومی باشد.

-
- 1- Gas Constant
 - 2- Tao-Mason
 - 3- Quantum & Associated Fluids
 - 4- Tunneling