دانشگاه کردستان

دانشکده علوم- گروه شیمی

محاسبه خواص انتقالی برای مخلوط گازهای متان- ترافلوئورومتان و بنزن- متانول

بااستفاده از روش نیمه‌تجربی وارون‌سازی

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی

(گرایش شیمی‌فیزیک)

مینا راستگار رحیم‌زاد

استاد راهنما

دکتر حمیدرضا رفیعی

خردادماه ۱۳۸۷

تشکر و قدردانی

حمد و سپاس بی نهایت خویش را تقدیم حضرت حق، خداوند بلند مرتبه می نمایم که در پیمودن این راه همیشه یار و مددکار من بود و هیچگاه مرا تنها نگذارد. صمیمانه‌ترین تشکر خود را، تقدیم خانواده عزیزم به‌ویژه پدرو مادر مهربانم می‌نمایم که همواره باعث امیدواری و دلگرمی من در زندگی بودند.

از استاد راهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر حمیدرضا رفیعی که در طول این مدت، از هیچ مساعدتی دریغ ننمودند و تجربیات گرانقدر خویش را در اختیار من قرار دادند، بی‌نهایت سپاسگزارم.

از اساتید محترم گروه شیمی علی‌الخصوص اساتیدی که در این مقطع در محضر درسشان بوده‌ام سپاسگذارم.

از کلیه دوستان و همکلاسی‌هایم خانم‌ها: طاهره زهره‌وند، زهرا انفرادی، سعادت اسلامی، ندا حیدری، آقایان: بهمن جامه بزرگ، رحیم حسینی و دیگر دوستان عزیز کمال تشکر و قدردانی را دارم.

کلیه حقوق مادی و معنوی مترتب بر نتایـج

مطالعات، ابتکارات و نوآوریهای ناشی از تحقیق موضوع

این پایان‌نامه (رسـاله) متعلق به دانشـگاه کردستان است.

تقدیم به

پدر عزیز و مادر مهربانم

فهرست مطالب

عنوان | صفحه

چکیده ..... هفده

فصل اول : مقدمه ۱

۱-۱- ارتباط موضوع تحقیق با کارهای قبل ۲

۱-۲- اهمیت موضوع ۵

۱-۳- اهداف و پرسش‌های مطرح شده ۵

۱-٤- محدودیت‌های پژوهش ٦

۱-۵- اجزای فصل‌های بعدی ٦

فصل دوم : پیشینه‌ی پژوهش ۷

۲-۱- نظریه جنبشی ساده شده گازها ۸

۲-۲- نظریه جنبشی دقیق گازها ۹

۲-۳- حل چپمن- انسکوگ ۱۱

۲-٤- مفهوم انتگرال‌های برخورد ۱۳

۲-۵- اصل حالات متناظر برای خواص انتقالی ۱۸

۲-٦-اصل حالات متناظر توسعه داده شده ۲۲

۲-۷- معادلات برای خواص انتقالی ۲٤

۲-۸- پتانسیل‌های بین‌مولکولی ۲۹

۲-۸-۱- تعیین نیروهای بین‌مولکولی از خواص انتقالی ۳۰

۲-۸-۲- استخراج نیروهای بین‌مولکولی از ضریب دوم ویریال ۳۰

۲-۸-۳- تعیین پتانسیل بین‌مولکولی از اندازه گیری های اسپکتروسکوپی ۳۱

۲-۸-٤- استفاده از داده‌های پراکندگی پرتو مولکولی برای تعیین پتانسیل بین‌مولکولی ۳۱

۲-۸-۵- استخراج پتانسیل از داده‌های سرعت صوت ۳۲

۲-۹- انواع توابع پتانسیل بین‌مولکولی ۳۲

۲-۹-۱- پتانسیل کره‌ی سخت ۳٤

۲-۹-۲- پتانسیل لنارد- جونز ۳٤

۲-۹-۳- نقطه مراکز دافعه ۳٦

۲-۹-٤- پتانسیل چاه مربع ۳٦

۲-۹-۵- مدل ساترلند ۳٦

۲-۹-٦- پتانسیل باکینگ‌هام ۳۷

فصل سوم: روش انجام کار ۳۸

۳-۱- روش وارون‌سازی ۳۹

فهرست مطالب

عنوان | صفحه

۳-۲- روش کار..... ٤۳
فصل چهارم: بحث و نتیجه‌گیری ٤۹
٤-۱-گاز خالص ایزوبوتان..... ۵۲
٤-۱-۱- ضریب ویسکوزیته ایزوبوتان..... ۵۲
٤-۱-۲- ضریب نفوذ جرمی ایزوبوتان..... ٦۰
٤-۱-۳- فاکتور نفوذ گرمایی ایزوبوتان..... ٦۱
٤-۲-گاز خالص نئوپنتان..... ٦۱
٤-۲-۱- ضریب ویسکوزیته نئوپنتان..... ٦۲
٤-۲-۲- ضریب نفوذ جرمی نئوپنتان..... ٦۳
٤-۲-۳- فاکتور نفوذ گرمایی نئوپنتان..... ٦٤
٤-۳- مخلوط گازی (متان- تترافلورومتان)..... ٦٤
٤-۳-۱- ضریب ویسکوزیته مخلوط گازی (متان- تترافلورومتان)..... ٦۵
٤-۳-۲- ضریب نفوذ جرمی مخلوط گازی (متان- تترافلورومتان)..... ٦٦
٤-۳-۳- فاکتور نفوذ گرمایی مخلوط گاز(متان- تترافلوئورومتان)..... ٦۷
٤-٤- مخلوط گازی (بنزن- متانول)..... ٦۷
٤-٤-۱- ضریب ویسکوزیته مخلوط گازی (بنزن- متانول)..... ٦۸
٤-٤-۲- ضریب نفوذ جرمی مخلوط گازی (بنزن- متانول)..... ۷۰
٤-٤-۳- فاکتور نفوذ گرمایی مخلوط گاز (بنزن- متانول)..... ۷۱
٤-۵- نتیجه‌گیری..... ۷۲
پیوست ۷٤
مراجع ۹۲

فهرست نمودارها

عنوان **صفحه**

شکل (۲-۱) : نمایشی از برخورد دو جسم..... ۱۶

شکل (۲-۲) : پتانسیل‌های مستقل از زاویه..... ۳۴

شکل (۲-۳) : پتانسیل لنارد- جونز..... ۳۵

نمودار(٤-۱) : نمودار درصد خطای ضریب ویسکوزیته در برابر دما، مقایسه شده با مقادیر تجربی مرجع [۱۰۵] برای گاز خالص ایزوبوتان در دانسیته های متفاوت..... ۵۷

نمودار(٤-۲) : نمودار درصد خطای ضریب ویسکوزیته در برابر دما، برای گاز خالص ایزوبوتان که با مقادیر تجربی مراجع [۱۰٦]، [۱۰۷] و[۱۰۸] که در نمودار به ترتیب با [۱]،[۲] و [۳] مشخص شده مقایسه گردیده است..... ۵۹

نمودار(٤-۳) : نمودار درصد خطای ضریب نفوذ در برابر دما، مقایسه شده با مقادیر تجربی مرجع [۱۰٦] برای گاز خالص ایزوبوتان..... ٦۰

نمودار(٤-٤): نمودار درصد خطای ضریب ویسکوزیته در برابر دما، مقایسه شده با مقادیر تجربی مرجع [۱۰٦] برای گاز خالص نئوپنتان..... ٦۲

نمودار(٤-۵): نمودار درصد خطای ضریب نفوذ در برابر دما، مقایسه شده با مقادیر تجربی مرجع [۱۰٦] برای گاز خالص نئوپنتان..... ٦۳

نمودار(٤-٦): نمودار درصد خطای ضریب ویسکوزیته در برابر دما، مقایسه شده با مقادیر تجربی مرجع [۱۰۹] برای مخلوط گاز(متان- تترافلوئورومتان) در کسرمولی‌های مختلف..... ٦٦

نمودار(٤-۷): نمودار درصد خطای ضریب نفوذ در برابر دما، مقایسه شده با مقادیر تجربی مرجع [۱۰۹] برای مخلوط گاز(متان- تترافلوئورومتان) در کسرمولی ۰/۵..... ٦۷

نمودار(٤-۸): نمودار درصد خطای ضریب ویسکوزیته در برابر دما، مقایسه شده با مقادیر تجربی مرجع [۱۱۰] برای مخلوط گاز (بنزن- متانول) در کسرمولی‌های مختلف ۷۰

نمودار(٤-۹): نمودار درصد خطای ضریب نفوذ در برابر دما، مقایسه شده با مقادیر تجربی مرجع [۱۱۰] برای مخلوط گاز (بنزن- متانول) در کسرمولی۰/۵..... ۷۱

نمودار(٤-۱۰):پتانسیل بهبود یافته‌ی لنارد-جونز برای سیستم (بنزن- متانول) و مقایسه‌ی آن با پتانسیل اولیه لنارد- جونز که در بالای نمودار آمده است..... ۷۲

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول (٤-١): انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته به‌دست آمده از برنامه اُهارا و اسمیت..... ٥٠

جدول (٤-٢): نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته..... ٥١

جدول (٤-٣): پارامترهای پتانسیل که برای گازهای مورد بررسی در محاسبات استفاده شدند[١] ٥٢

جدول (٤-٤): انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = ۰/۰۰۹۹۷\ mol.l^{-1}$ که به‌وسیله میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ٥٣

جدول (٤-٥): نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = ۰/۰۰۹۹۷\ mol.l^{-1}$ که به‌وسیله میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ٥٣

جدول (٤-٦): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٥] برای گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = ۰/۰۰۹۹۷\ mol.l^{-1}$..... ٥٤

جدول (٤-٧): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٥] برای گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = ۰/۰۱۰۲۳\ mol.l^{-1}$..... ٥٤

جدول (٤-٨): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٥] برای گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = ۰/۰۲۱۳۸\ mol.l^{-1}$..... ٥٥

جدول (٤-٩): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٥] برای گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = ۰/۰۲۹۵۵\ mol.l^{-1}$..... ٥٥

جدول (٤-١٠): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٥] برای گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = ۰/۰۳۷۹۶\ mol.l^{-1}$..... ٥٦

جدول (٤-١١): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٥] برای گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = ۰/۰۴۷۸۹\ mol.l^{-1}$..... ٥٦

جدول (٤-١٢): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٦] برای گاز خالص ایزوبوتان..... ٥٨

جدول (٤-١٣): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٧] برای گاز خالص ایزوبوتان..... ٥٨

جدول (٤-١٤): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٨] برای گاز خالص ایزوبوتان..... ٥٩

جدول (٤-١٥): مقادیر ضریب نفوذ پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٦] برای گاز خالص ایزوبوتان..... ٦٠

جدول (٤-١٦): مقادیر فاکتور نفوذ گرمایی پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی برای گاز خالص ایزوبوتان..... ٦١

جدول (٤-١٧): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٦] برای گاز خالص نئوپنتان..... ٦٢

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول (٤-١٨): مقادیر ضریب نفوذ پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٦] برای گاز خالص نئوپنتان..... ٦٣

جدول (٤-١٩): مقادیر فاکتور نفوذ گرمایی پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی برای گاز خالص نئوپنتان..... ٦٤

جدول (٤-٢٠): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٩] برای مخلوط گاز(متان- تترافلوئورومتان) در کسر مولی های مختلف..... ٦٥

جدول (٤-٢١): مقادیر ضریب نفوذ پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١٠٩] برای مخلوط گاز(متان- تترافلوئورومتان) در کسر مولی ٠/٥..... ٦٦

جدول (٤-٢٢): مقادیر فاکتور نفوذ گرمایی پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی برای مخلوط گاز (متان- تترافلوئورومتان) در کسر مولی ٠/٥..... ٦٧

جدول (٤-٢٣): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١١٠] برای مخلوط گازهای(بنزن- متانول) در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = ٠/٧٧٦٧)..... ٦٨

جدول (٤-٢٤): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیرتجربی مرجع [١١٠] برای مخلوط گازهای(بنزن- متانول) در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = ٠/٥٩٢٩)..... ٦٨

جدول (٤-٢٥): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیرتجربی مرجع [١١٠] برای مخلوط گازهای (بنزن- متانول) در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = ٠/٤١٦)..... ٦٩

جدول (٤-٢٦): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١١٠] برای مخلوط گازهای(بنزن- متانول) در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = ٠/١٩٨٩)..... ٦٩

جدول (٤-٢٧): مقادیر ضریب ویسکوزیته پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیرتجربی مرجع [١١٠] برای مخلوط گازهای(بنزن- متانول) در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = ٠/١٩٠٣)..... ٦٩

جدول (٤-٢٨): مقادیر ضریب نفوذ پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی و مقایسه آن با مقادیر تجربی مرجع [١١٠] برای مخلوط گازهای(بنزن- متانول) درکسر مولی٠/٥..... ٧٠

جدول (٤-٢٩): مقادیر فاکتور نفوذ گرمایی پیش‌بینی شده به‌وسیله روش وارون‌سازی برای مخلوط گازی (بنزن- متانول) درکسر مولی ٠/٥..... ٧١

فهرست پیوست

عنوان **صفحه**

جدول 1) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/01023\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷٤

جدول2) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/01023\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷٤

جدول 3) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/02138\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷۵

جدول4) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/02138\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷۵

جدول 5) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/02955\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷٦

جدول6) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/02955\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷٦

جدول 7) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/03796\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷۷

جدول8) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/03796\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷۷

جدول 9) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/04789\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷۸

جدول10) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان در $\rho = 0/04789\ mol.l^{-1}$ که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷۸

جدول 11) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان جهت مقایسه با مراجع [107] و[108] که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷۹

جدول12) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان برای مقایسه با مراجع [۱۰۷] و[۱۰۸] که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۷۹

جدول 13) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان برای مقایسه با مقادیر موجود در مرجع [۱۰۸] که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۰

جدول 14) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز خالص ایزوبوتان برای مقایسه با مقادیر موجود در مرجع [۱۰۸] که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۰

جدول 15) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته برای گاز خالص نئوپنتان که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۱

جدول 16) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته برای گاز خالص نئوپنتان که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۱

فهرست پیوست

عنوان **صفحه**

جدول 17) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز تترافلوئورومتان در مخلوط گازی(متان- تترافلوئورومتان) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۲

جدول 18) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز تترافلوئورومتان در مخلوط گازی (متان- تترافلوئورومتان) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۲

جدول 19) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متان در مخلوط گازی(متان- تترافلوئورومتان) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۲

جدول20) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متان در مخلوط گازی (متان- تترافلوئورومتان) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۲

جدول 21) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز تترافلوئورومتان در مخلوط گازی(متان- تترافلوئورومتان) برای محاسبه ضریب نفوذ و فاکتور نفوذ گرمایی در کسر مولی 0/5 که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۳

جدول ۲۲) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز تترافلوئورومتان در مخلوط گازی (متان- تترافلوئورومتان) برای محاسبه ضریب نفوذ و فاکتور نفوذ گرمایی در کسر مولی 0/5 که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۳

جدول 23) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متان در مخلوط گازی(متان- تترافلوئورومتان) برای محاسبه ضریب نفوذ و فاکتور نفوذ گرمایی در کسر مولی 0/5 که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۳

جدول 24) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متان در مخلوط گازی (متان- تترافلوئورومتان) برای محاسبه ضریب نفوذ و فاکتور نفوذ گرمایی در کسر مولی 0/5 که با استفاده از میان‌یابی به‌دست آمده‌اند..... ۸۳

جدول 25) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/7767) به‌دست آمده‌اند..... ۸۴

جدول 26) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی (بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/7767) به‌دست آمده‌اند..... ۸۴

جدول 27) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/7767) به‌دست آمده‌اند..... ۸۴

جدول 28) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی (بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/7767) به‌دست آمده‌اند..... ۸۵

جدول 29) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/5929) به‌دست آمده‌اند..... ۸۵

جدول 30) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی (بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/5929) به‌دست آمده‌اند..... ۸۵

فهرست پیوست

عنوان **صفحه**

جدول 31) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/5929) به‌دست آمده‌اند.....۸۶

جدول 32) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی (بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/5929) به‌دست آمده‌اند.....۸۶

جدول 33) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی (بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/416) به‌دست آمده‌اند.....۸۶

جدول 34) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی (بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/416) به‌دست آمده‌اند.....۸۷

جدول 35) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی (بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/416) به‌دست آمده‌اند.....۸۷

جدول 36) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی (بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/416) به‌دست آمده‌اند.....۸۷

جدول 37) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته کهبا استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/1989) به‌دست آمده‌اند.....۸۸

جدول 38) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/1989) به‌دست آمده‌اند.....۸۸

جدول 39) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/1989) به‌دست آمده‌اند.....۸۸

جدول 40) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/1989) به‌دست آمده‌اند.....۸۹

جدول 41) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/1903) به‌دست آمده‌اند.....۸۹

جدول 42) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/1903) به‌دست آمده‌اند.....۸۹

جدول 43) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/1903) به‌دست آمده‌اند.....۹۰

جدول 44) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب ویسکوزیته که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی ($x_{C_6H_6}$ = 0/1903) به‌دست آمده‌اند.....۹۰

فهرست پیوست

عنوان **صفحه**

جدول 45) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب نفوذ و فاکتور نفوذ گرمایی که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی 0/5 به‌دست آمده‌اند..... ۹۰
جدول 46) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز بنزن در مخلوط گازی (بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب نفوذ و فاکتور نفوذ گرمایی که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی0/5 به‌دست آمده‌اند..... ۹۱
جدول 47) انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب نفوذ و فاکتور نفوذ گرمایی که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی 0/5 به‌دست آمده‌اند..... ۹۱
جدول 48) نسبت انتگرال‌های برخورد کاهش‌یافته گاز متانول در مخلوط گازی(بنزن- متانول) برای محاسبه ضریب نفوذ و فاکتور نفوذ گرمایی که با استفاده از میان‌یابی در کسرمولی 0/5 به‌دست آمده‌اند..... ۹۱

چکیده

بر اساس روش نیمه‌تجربی وارون‌سازی و به کمک یک تابع همبستگی پیشنهاد شده برای ویسکوزیته، ابتدا تابع پتانسیل جفتی سیستم متانول- بنزن استخراج شد. از پتانسیل لنارد- جونز (6-12) به‌عنوان پتانسیل خام اولیه استفاده گردید. سپس بر اساس این تابع پتانسیل خواص انتقالی شامل ضریب ویسکوزیته، ضریب نفوذ جرمی و فاکتور نفوذ گرمایی برای گازهای خالص ایزوبوتان و نئوپنتان و نیز سیستم‌های مخلوط متانول- بنزن و متان- تترافلوئورومتان در محدوده‌ی وسیعی از دما و ترکیب پیش‌بینی و با مقادیر تجربی موجود مقایسه گردید. دقت نتایج در مورد ویسکوزیته در محدوده‌ی 2% ± و در مورد نفوذ در محدوده‌ی 5% ± نسبت به مقادیر تجربی به‌دست آمده است.

کلمات کلیدی: خواص انتقالی، ویسکوزیته، نفوذ، نفوذ گرمایی، ایزوبوتان، نئوپنتان، متانول- بنزن، متان- تترافلوئورومتان

فصل اول

مقدمه

پیشرفت روزافزون صنایع در زمینه‌های مختلف و مواجه شدن با فرایندهایی که با انتقال جرم و انرژی همراهند، اهمیت بررسی و مطالعه‌ی خواص انتقالی و ترموفیزیکی سیالات را بیش‌ازپیش نمایان می‌سازد. اهمیت این خواص از این واقعیت ناشی می‌شود که دانشی از خواص انتقالی اشکال مختلف مواد، به‌دلیل تنوع وسیع مسائل در زمینه‌ی مهندسی، ضرورت دارد، به‌عبارت دیگر، از نقطه‌نظر مهندسی، تعیین خواص ترموفیزیکی گازها در مقیاس صنعتی به‌دلیل رشد بی‌رویه مصرف انرژی، امری لازم است، زیرا کنترل دایمی آلودگی هوا نیاز به اطلاعاتی وسیع در مورد خواص گازهایی دارد که کمتر به‌صورت خالص اندازه‌گیری شده‌اند.

خواص ترموفیزیکی گازها نظیر چگالی، ظرفیت‌گرمایی، ضرایب ویسکوزیته و نفوذ، همچنین هدایت‌گرمایی کمیت‌های مهمی هستند که در بهینه‌سازی رآکتورهای شیمیایی، فرآیندهای جداسازی، تهویه و سرماسازها، دانشی دقیق از این خواص ضروری است، نیز در فرآیندهای روان‌سازی[1]، ویسکوزیته و هدایت‌گرمایی سیال روان‌ساز از اهمیت فراوانی برخوردارند[1] .

---

[1] -Lubrication

در صنایع به‌دلیل تعدد فرایندها و ابزارها به‌ویژه به‌واسطه‌ی مواجهه با مخلوط سیالات و شرایط عمل متفاوت آنها، اهمیت بررسی خواص ترموفیزیکی و پیش‌بینی این خواص اهمیتی دوچندان می‌یابد. در این بررسی خواص انتقالی گازها در چگالی کم مطالعه می‌شود، این خواص در چگالی پایین‌تر برخلاف حالت چگال[1] مرتبط با نیروهای حاکم بین مولکول‌های گاز هستند.

1-1- ارتباط موضوع تحقیق با کارهای قبلی

بررسی دینامیک گازها در دماهای بالا از گذشته، بسیار مورد توجه بوده خصوصاً در فشارهای به قدر کافی پایین، چون گونه‌های شیمیایی می‌توانند به‌صورت گاز ایده‌آل فرض شوند .

چپمن[2] (1916) و انسکوگ[3] (1917) حلی از معادله بولتزمان[4] ارائه دادند. تئوری آنها برای گازهای رقیق بدون درنظر گرفتن شیوه‌های انرژی داخلی به‌کار گرفته شد و در نتیجه تخمین شارهای انتقالی ممکن شدند [2] .

توصیف نظری پدیده‌ی انتقال شامل قسمتی از مکانیک آماری غیر تعادلی است که به‌صورت عبارتهایی از خواص ماکروسکوپی مولکولها و پتانسیل برهم‌کنشی آنهاست. دانشی دقیق از پتانسیل‌های برهم‌کنش بین اتمی و بین مولکولی به‌منظور پیش‌گویی و محاسبه خواص مولکولی لازم است، زیرا نیروهای بین مولکولی مسئول تمام خواص مواد در تمام فازها هستند. با در دست داشتن یک پتانسیل بین مولکولی دقیق و تئوری‌هایی که این پتانسیل را به خواص مختلف سیستم ارتباط می‌دهند، می‌توان این خواص را با صحت خوبی پیش‌بینی نمود. این بدان معنی است که اگر انرژی پتانسیل جفتی[5] شناخته شود ارزیابی خواص ترموفیزیکی سیالات سرراست خواهد بود و نیاز به کار تجربی تا حد زیادی کاهش پیدا می‌کند، چون تجهیز و روزآمد کردن آزمایشگاه‌های مناسب برای تعیین این خواص مستلزم هزینه فراوان است. افزون بر این انجام آزمایش‌های متنوع که گستره‌ی وسیعی از

---

۱ -Dense
۲ -Chapman
۳ -Enskog
٤ -Boltzmann
٥ -Pair potential energy

سیالات را در محدوده‌ی وسیعی از دما دربرگیرد، بسیار وقت‌گیر و توانفرسا خواهد بود، لذا محاسبه‌ی نظری این خواص راه سهل‌الوصول‌تری برای دستیابی سریع و صریح به این خواص می‌باشد، حال مسئله این است که چگونه می‌توان پتانسیل‌های بین‌مولکولی را به‌دست آورد ؟

در سال‌های اخیر ارزیابی انرژی پتانسیل بین مولکولی از موضوعات مهمی بوده که از هر دو دیدگاه تئوری و تجربی به آن پرداخته شده است، لیکن راهی مستقیم برای اندازه‌گیری پتانسیل بین مولکولی شناخته نشده است و آنچه معمولاً در دسترس است، اندازه گیری چند خاصیت مشاهده‌پذیر ماکروسکوپی است که به‌طریقی تابع نیروهای بین مولکولی هستند.

منبع نظری اطلاعات درباره ماهیت انرژی پتانسیل بین مولکولی، مکانیک کوانتوم (روشهای اب اینیشیو[1]) است [3-12]. منابع تجربی برای به‌دست آوردن اطلاعات درباره پتانسیل‌های بین مولکولی شامل آزمایشات پراکندگی پرتو مولکولی [13-29]، مطالعات اسپکتروسکوپی [30-42] ، داده‌های سرعت صوت [43-45]، خواص تعادلی، ترمودینامیک و خواص ساختاری فاز متراکم نظیر ساختار بلور و آنتالپی تصعید [3و6]، هستند.

دو روش اساسی برای استخراج تابع پتانسیل بین مولکولی از اطلاعات تجربی وجود دارد، راه اول که توسط بارکر[2] و همکارانش [46-48] ارائه شد، تخمین اولیه پتانسیل‌های برهم‌کنش بر پایه‌ی خواص ماکروسکوپی و از طریق مدل‌های پارامتردار بوده است. در این روش که برازش[3] نام دارد، یک مدل پتانسیلی چندپارامتری برای تابع پتانسیل‌های جفتی، درنظر گرفته می‌شود و پارامترها توسط روش آزمون و خطا آنقدر تغییر داده می‌شوند تا مناسب‌ترین انطباق با کمترین اختلاف بین تئوری و تجربه پدید آید. نقص اصلی این طرز عمل آن است که با افزایش تعداد پارامترها، عمل برازش مشکل می‌شد و این محدودیت محاسباتی باعث می‌شود

---

۱ -Ab initio
۲ -Barker
۳ -Fitting

که تعداد پارامترهای تنظیم‌پذیر در مدل ارائه شده به حداقل تعداد کاهش پیدا کند و مدل شکلی خام پیدا می‌نماید. نقص دیگر آن است که پتانسیل به‌دست آمده وابسته به خواص استفاده شده در روش و دامنه‌ی دمایی به کار رفته داشته و بنابراین یکتا[1] نخواهد بود .

راه دوم که توسط اسمیت[2] و همکارانش توسعه داده شده روش وارون‌سازی[3] مستقیم است که به هیچ فرض صریحی درباره شکل تابع پتانسیل وابسته نیست و پتانسیل به‌دست آمده، یکتاست [49-53]. این روش تکرارشونده[4] ، انرژی پتانسیل جفتی مؤثر را از داده‌های تجربی تولید می‌کند. تعیین مستقیم برهم‌کنش بین مولکولی غیر یکسان بر مبنای برهم‌کنش‌های شناخته شده برای مولکول‌های یکسان، امری مهم است که روش وارون‌سازی این امکان را مهیا می‌کند.

خواص ترموفیزیکی توده‌ی[5] گاز، منبع خوبی برای به‌دست آوردن تابع انرژی پتانسیل بین مولکولی بوده و از میان این خواص، خواص انتقالی در چگالی کم از منابع مهم محسوب می‌شوند، به‌دلیل این‌که خواص انتقالی گازها به‌سهولت در دسترس و قابل‌اندازه‌گیری هستند. از این خواص می‌توان ضرایب نفوذ، ویسکوزیته و هدایت‌گرمایی را نام برد. از میان آنها ویسکوزیته از نظر اندازه‌گیری، آسان‌تر و همچنین دقت اندازه‌گیری آن بالاست و برخلاف هدایت‌گرمایی تقریباً مستقل از سهم درجات آزادی درونی بوده و تحت تأثیر برخوردهای غیرالاستیک واقع نمی‌شود. به‌طور کلی این تحقیق دو مرحله دارد: در مرحله‌ی اول ضرایب ویسکوزیته‌ی تجربی به‌فرم یک تابع همبستگی[6] به‌عنوان اطلاعات ورودی برای ارزیابی پتانسیل بین مولکولی به‌کار می رود و به‌واسطه‌ی ماهیت تکرارشونده‌ی روش، پتانسیل بهبودیافته تولید می‌شود و در مرحله‌ی بعد این پتانسیل، برای

---

[1] -Unique
[2] -Smith
[3] -Inversion
[4] -Iterative
[5] -Bulk
[6] -Correlation function

پیش‌بینی خواص انتقالی گازهای خالص ایزوبوتان، نئوپنتان و سیستم‌های مخلوط (متان- تترافلوئورومتان) و (متانول- بنزن) در محدوده‌ی وسیعی از دما و ترکیب استفاده می‌شود. منظور از این پیش‌بینی، تخمین خواص انتقالی، توسط یک چهارچوب نظری اصولی و استفاده از کمیت‌های فیزیکی معدود به‌عنوان اطلاعات ورودی است. در این پژوهش، ضرایب ویسکوزیته با دقت 2% ± و ضرایب نفوذ با دقت در محدوده‌ی 5% ± نسبت به مقادیر تجربی پیش‌بینی شده‌اند.

1-2- اهمیت موضوع

همان‌طوری‌که قبلاً ذکر شد، از آنجا که نمی‌توان با اندازه‌گیری تنها، نیاز صنعت را برای داده‌های خواص ترموفیزیکی برآورده ساخت، استفاده از این روش می‌تواند جایگزین مناسبی برای اندازه‌گیری مستقیم این خواص باشد.

گازهای خالص و مخلوطی که در این تحقیق بررسی شدند همگی دارای کاربردهای مختلف در صنایع، اعم از صنایع شیمیایی، سوختی و غیره هستند، خصوصاً مخلوط (متانول- بنزن) به‌دلیل این‌که سیستمی قطبی- غیرقطبی را نمایش می‌داد، از نظر بررسی لازم به‌نظر می‌رسید، نتایج به‌دست آمده برای این سیستم مخلوط، بسیارخوب، قابل‌قبول و نیز با دقت بالایی نسبت به داده‌های تجربی بود که این یکی از مزایای مهم این تحقیق محسوب می‌شود.

1-3- اهداف و پرسش‌های مطرح شده

هدف روش وارون‌سازی، به‌دست آوردن انرژی پتانسیل بین مولکولی به‌وسیله‌ی استفاده مستقیم از مقادیر تجربی، بدون اتخاذ یک مدل ریاضی صریح برای تابع پتانسیل و نیز پیش‌گویی خواص انتقالی درچگالی کم برای سیستم‌های مذکور در دامنه‌ی وسیع دمایی است، مزیت عمده این روش، این است که مقادیر یک خاصیت می‌توانند در تعیین و پیش‌گویی خواص دیگر مورد استفاده قرار گیرند. جزئیات این طرز عمل در فصل‌های آتی،