دانشکده علوم
گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش فیزیک

تعیین خواص حجمی کوپلیمرها

استاد راهنما:
دکتر فخری یوسفی

استاد مشاور:
دکتر مهدی خیرمند

پژوهشگر:
مینا شیشه بر

مهر ماه ۱۳۹۲

تقدیم به

پدر و مادر مهربانم؛

که در سختی‌ها و دشواری‌های زندگی

همواره یاوری دلسوز و فداکار و پشتیبانی محکم و مطمئن برایم بوده اند.

همسر عزیزم؛

که سایه مهربانیش سایه سار زندگیم می‌باشد و در این راه همراه و همگام من بوده.

پروردگارا حسن عاقبت، سلامت و سعادت را برای آنان مقدر نما.

نام: مینا **نام خانوادگی: شیشه بر**
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد **رشته و گرایش: شیمی فیزیک**
استاد راهنما: دکتر فخری یوسفی **تاریخ دفاع: ۱۳۹۲/۰۷/۲۰**

تعیین خواص حجمی کوپلیمرها

چکیده:

خواص حجمی مواد کوپلیمری دارای اهمیت زیادی برای دانشمندان و مهندسان پلیمر است. بنابراین، یک معادله حالت دقیق برای توضیح این رفتار در طیف وسیعی از دما و فشار مورد نیاز است. معادله حالت مهمترین ابزار در فراهم آوردن پایه ای برای تعیین خواص دقیق ترموفیزیکی است و کاربرد آن برای هر سیستم به دقت و صحت داده های ورودی بستگی دارد . در سال ۱۹۹۴، تائو و میسون با اضافه کردن ترم تصحیح اختلالی به منظور وارد کردن اثر جاذبه در معادله حالت ISM آن را به شکل امروزی آن در آورده و معادله حالت TM را معرفی کردند در این تحقیق، معادله حالت تائو - میسون (TM EOS) برای محاسبه خواص حجمی کوپلیمرها استفاده شد، مانند : پلی (اتیلن - پروپیلن) (PEP)، پلی (اتیلن - وینیل استات) (PEVA)، پلی (اتیلن – متاکریلیک اسید) (PEMA) ، پلی (اتیلن – اکریلیک اسید) (PEAA)، پلی (اتیلن - وینیل الکل) (PEVOH)، پلی (استایرن - اکر یلو نیتریل) (PSAN)، پلی (اکر یلو نیتریل - بوتادین) (PANB) .

برای اجرای معادله حالت تائو میسون، ضریب دوم ویریال $B_2(T)$ ، حجم موثر واندروالس $b(T)$ و فاکتور تصحیح $\alpha(T)$ ، باید مشخص شود. در کار اول، ضریب دوم ویریال از دو پارامتر همبستگی حالات متناظر ، که با دو ثابت به عنوان پارامتر اندازه گیری مانند درجه حرارت (T_r) و دانسیته در شرایط اتاق (ρ_r) تشکیل شده است محاسبه شد. در کار دوم ، ضریب دوم ویریال از رابطه قطعی و بوشهری محاسبه شد. نتایج به دست آمده نشان می دهد که دو اثر توافق خوبی با داده های تجربی با میانگین مطلق انحراف ، ۱/۴٪ و ۰/۹٪ دارد.

واژه‌های کلیدی: کوپلیمر، معادله حالت، ضریب دوم ویریال، خواص حجمی

رساله حاضر، حاصل پژوهشهای نگارنده در دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش فیزیک است که در مهر ماه سال ۱۳۹۲ در دانشکده علوم پایه دانشگاه یاسوج به راهنمایی سرکار خانم دکتر فخری یوسفی و مشاوره جناب آقای دکتر مهدی خیرمند از آن دفاع شده است و کلیه حقوق مادی و معنوی آن متعلق به دانشگاه یاسوج است.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: کوپلیمرها

۱-۱ بسپار(پلیمر) ۱
۱-۱-۱ تاریخچه پلیمرها ۱
۱-۱-۲ ساختار پلیمرها ۲
۱-۲ هموپلیمرها ۲
۱-۳ کوپلیمرها ۲
۱-۳-۱ نسبت واکنش پذیری ۳
۱-۳-۲ خواص کوپلیمرها ۳
۱-۴-۱ کوپلیمرهای تصادفی یا بی‌نظم ۳
۱-۴-۲ کوپلیمرهای متناوب ۴
۱-۴-۳ کوپلیمرهای دسته‌ای ۴
۱-۴-۴ کوپلیمرهای پیوندی ۴
۱-۵ نمونه‌ای از کوپلیمرها ۵

فصل دوم: معادله حالت

۲-۱ تاریخچه ۶
۲-۱-۲ قانون چارلز گیلوساک ۷
۲-۱-۳ قانون فشارهای جزئی دالتون ۷
۲-۱-۴ قانون گازهای ایده آل ۷
۲-۱-۵ معادله حالت واندروالس ۷
۲-۲ معادلات حالت تجربی ۸
۲-۲-۱ معادله حالت بتی-بریجمن ۸
۲-۲-۲ معادله حالت رابین-وب-بندیکت ۹
۲-۲-۳ معادله حالت تیت ۹
۲-۲-۴ معادله حالت مورناگان ۱۰
۲-۳ معادلات حالت نیمه تجربی ۱۱
۲-۳-۱ معادله حالت واندروالس ۱۱
۲-۳-۲ معادله حالت ردلیخ-وانگ ۱۳
۲-۳-۳ معادله حالت سوآو-ردلیخ-وانگ ۱۳
۲-۳-۴ معادله حالت پینگ-رابینسون ۱۴
۲-۳-۵ معادله حالت الیوت-دانوهیو-سورش ۱۵
۲-۳-۶ معادله حالت فولر ۱۶

۲-۴ ضریب دوم ویریال و تصحیحات کوانتومی ۱۷
۲-۴-۱ روش‌های پیدا کردن ضریب دوم ویریال ۱۸
۲-۴-۱-۱ استفاده از قانون حالات متناظر ۱۸
۲-۴-۱-۲ استفاده از پتانسیل‌های بین مولکولی برای تعیین مقادیر B(T) ۲۰
۲-۵ نقش نیروهای جاذبه و دافعه در ساختار سیال متراکم ۲۱
۲-۵-۱ نظریه اختلال ۲۱
۲-۵-۲ تئوری اختلال ویکز-چندلر-اندرسون(WCA) ۲۳
۲-۶ معادلات حالت از دیدگاه تئوری اختلال ۲۳
۲-۶-۱ معادله حالت کارناهان-استارلینگ ۲۳
۲-۶-۲ معادله حالت کارناهان-استارلینگ-ردلیخ-وانگ ۲۴
۲-۶-۳ نظریه سانگ-میسون ۲۴

فصل سوم: مدل سازی ترمودینامیکی

۳-۱ معادله حالت ایهم- سانگ- میسون (ISM) ۲۸
۳-۱-۱ معادله حالت ISM برای سیالات خالص ۲۸
۳-۱-۲ معادله حالت ISM برای مخلوط‌ها ۲۸
۳-۲ معادله حالت تائو-میسون(TM) ۲۹
۳-۲-۱ معادله حالت TM برای سیالات خالص ۳۲
۳-۲-۲ معادله حالتTM برای مخلوط‌ها ۳۳

فصل چهارم: محاسبات و نتایج

۴-۱ بحث و نتیجه گیری ۳۶
۴-۱-۱ تصحیحات اعمال شده بر روی معادله حالت TM ۳۶
۴-۱-۱-۱ کار اول ۳۶
۴-۱-۱-۲ کار دوم ۴۰

فهرست جدول‌ها

عنوان و شماره صفحه

کار اول

جدول (۴-۱) ضرایب مورد نیاز برای بدست آوردن پارامتر براساس معادله (۴-۴) برای معادله حالت تائو-میسون..... ۴۶
جدول (۴-۲) اطلاعات مورد نیاز برای کوپلیمرها با استفاده از مرجع [۶۴-۵۹] ۴۶
جدول(۴-۳) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEP)(۲۳٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۴۷
جدول(۴-۴) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEP) (۵۷٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]..... ۴۷
جدول(۴-5) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEP) (۷۶٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]..... ۴۸
جدول(۴-۶) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEP)(۸۴٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]..... ۴۸
جدول(۴-۷) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۱۴٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]..... ۴۹
جدول (۴-۸) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEVA) (۱۸٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]..... ۴۹
جدول (۴-۹) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۲۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۰
جدول(۴-۱۰) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEVA) (۲۸٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۰
جدول(۴-۱۱) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۳۳٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۱
جدول(۴-۱۲) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۴۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۱
جدول(۴-۱۳) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEMA) (۴٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۲
جدول(۴-۱۴) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEMA) (۹٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]..... ۵۲

جدول(۴-۱۵) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEMA) (۱۱/۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۳
جدول(۴-۱۶) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEMA) (۱۲٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۳
جدول(۴-۱۷) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEMA) (۱۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۴
جدول(۴-۱۸) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEMA) (۲۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۴
جدول(۴-۱۹) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEAA) (۹٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۵
جدول(۴-۲۰) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEAA) (۱۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۵
جدول(۴-۲۱) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEAA) (۲۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۶
جدول(۴-۲۲) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVOH) (۵۶٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۶
جدول(۴-۲۳) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVOH) (۶۲٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۷
جدول(۴-۲۴) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVOH) (۷۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۷
جدول(۴-۲۵) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PANB) (۶۷٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۸
جدول(۴-۲۶) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PSAN) (۲۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۵۸
جدول(۴-۲۷) میانگین انحرافات مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده در دماها و فشارهای مختلف نسبت به مقادیر تجربی[۶۵]. ۵۹
کار دوم
جدول(۴-۲۸) ضرایب مورد نیاز برای بدست آوردن پارامتر λ براساس معادله (۴-۱۰)برای معادله حالت تائو-میسون..... ۶۰
جدول(۴-۲۹) اطلاعات مورد نیاز برای کوپلیمرها با استفاده از مرجع [۶۹-۶۷] ۶۰
جدول(۴-۳۰) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته (PEP) (۲۳٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۱
جدول(۴-۳۱) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEP) (۵۷٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۱
جدول(۴-۳۲) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEP) (۷۶٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۲
جدول(۴-۳۳) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEP) (۸۴٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۲
جدول(۴-۳۴) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEVA) (۱۴٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۳
جدول(۴-۳۵) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEVA) (۱۸٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۳

جدول(۴-۳۶) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEVA) (۲۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۴
جدول(۴-۳۷) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۲۸٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]..... ۶۴
جدول(۴-۳۸) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۳۳٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۵
جدول(۴-۳۹) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEVA) (۴۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۵
جدول(۴-۴۰) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEMA) (۴٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]..... ۶۶
جدول(۴-۴۱) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEMA) (۹٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۶
جدول(۴-۴۲) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEMA) (۱۱/۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۷
جدول(۴-۴۳) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEMA) (۱۲٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۷
جدول(۴-۴۴) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEMA) (۱۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۸
جدول(۴-۴۵) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEMA) (۲۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۸
جدول(۴-۴۶) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEAA) (۹٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]..... ۶۹
جدول(۴-۴۷) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEAA) (۱۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۶۹
جدول(۴-۴۸) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEAA) (۲۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۷۱
جدول(۴-۴۹) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEVOH) (۵۶٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۷۱
جدول(۴-۵۰) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVOH) (۶۲٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۷۲
جدول(۴-۵۱) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVOH)(۷۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۷۲
جدول(۴-۵۲) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PANB) (۶۷٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۷۳
جدول(۴-۵۳) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PSAN) (۲۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵]. ۷۳
جدول(۴-۵۴) میانگین انحرافات مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده در دماها و فشارهای مختلف نسبت به مقادیر تجربی[۶۵]. ۷٤

کار اول:

جدول (۴-۱) ضرایب مورد نیاز برای بدست آوردن پارامتر λ براساس معادله (۴-۴) برای معادله حالت تائو-میسون

Copolymer / Coefficient	PEP	PEVA	PEMA	PEVOH	PEAA	PSAN	PANB
a	0.5307	0.4484	0.3830	0.6354	0.3894	0.6174	0.5022
b	-2.4678 $\times 10^{-5}$	0.1918 $\times 10^{-3}$	0.5801 $\times 10^{-3}$	-0.6752 $\times 10^{-3}$	0.5533 $\times 10^{-3}$	-0.6747 $\times 10^{-3}$	-0. 1913 $\times 10^{-3}$
c	-5.8919 $\times 10^{-5}$	-4.668 $\times 10^{-5}$	-5.537 $\times 10^{-5}$	-3.7298 $\times 10^{-5}$	-4.8023 $\times 10^{-5}$	-1.2187 $\times 10^{-5}$	-1.5632 $\times 10^{-5}$
d	-6.53603 $\times 10^{-7}$	-7.3954 $\times 10^{-7}$	-1.2515 $\times 10^{-6}$	1.4576 $\times 10^{-7}$	-1.2022 $\times 10^{-6}$	2.6710 $\times 10^{-7}$	-1.34041 $\times 10^{-7}$
e	-1.24577 $\times 10^{-8}$	-9.2029 $\times 10^{-9}$	-8.719 $\times 10^{-9}$	-7.3352 $\times 10^{-9}$	-7.4909 $\times 10^{-9}$	-2.0697 $\times 10^{-8}$	-2.1399 $\times 10^{-8}$
f	2.51422 $\times 10^{-7}$	2.0349 $\times 10^{-7}$	2.222 $\times 10^{-7}$	1.83029 $\times 10^{-7}$	1.9612 $\times 10^{-7}$	2.2096 $\times 10^{-7}$	2.3256 $\times 10^{-7}$

جدول (۴-۲) اطلاعات مورد نیاز برای کوپلیمرها با استفاده از مرجع [۶۴-۵۹]

copolymer	MW(g/mol)	**ρ**(g/mol) at (25 ℃)
poly (ethylene-co- acrylic acid)	91.38	1.08
poly (styrene-co- acrylonitrile)	32.01-36.85	0.96
poly (ethylene-co-propylene)	31.26-39.77	0.90
poly (ethylene-co-vinyl alcohol)	36.98-39.21	1.19
poly (ethylene-co-vinyl acetate)	36.17-51.27	0.95
Poly (acrylonitrile-co-butadiene)	115.36	1.00
poly (ethylene-co-methacrylic acid)	30.37-39.65	0.94

جدول(۴-۳) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEP)(۲۳٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=295.45(K) %Dev	T=388.25(K) %Dev	T=479.15(K) %Dev	T=559.65(K) %Dev
X_2=0.23				
0	2.2	1.6	0.9	1.4
200	2.8	0.6	0.0	1.9
400	3.2	0.1	0.0	1.0
600	3.4	0.7	0.2	0.6
800	3.4	1.1	0.6	0.2
1000	3.3	1.4	1.0	0.3
1200	2.9	1.5	1.3	0.6
1400	2.3	1.5	1.6	1.0
1600	1.5	1.3	1.7	1.5
1800	0.5	1.0	1.8	1.9
2000	0.7	0.5	1.8	2.3

جدول(۴-۴) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEP) (۵۷٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=295.35(K) %Dev	T=385.55(K) %Dev	T=483.65(K) %Dev	T=581.85(K) %Dev
X_2=0.57				
0	1.0	1.3	1.4	1.5
200	0.2	0.6	0.5	1.0
400	0.3	0.1	0.8	0.2
600	0.6	0.4	0.7	1.8
800	0.6	0.7	0.4	2.2
1000	0.5	0.8	0.1	1.8
1200	2.0	0.9	0.2	1.6
1400	0.4	0.8	0.5	1.0
1600	1.2	0.6	0.7	0.5
1800	2.1	0.2	0.8	0.0
2000	3.3	0.3	0.3	0.4

جدول(۴-۵) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEP) (۷۶٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=295.75(K) %Dev	T=367.35(K) %Dev	T=479.65(K) %Dev	T=569.75(K) %Dev
X_2=0.76				
0	1.1	1.4	1.2	3.5
200	0.4	0.7	0.8	3.1
400	0.1	0.3	1.3	1.7
600	0.3	0.1	1.3	2.9
800	0.4	0.4	1.0	3.1
1000	0.2	0.5	0.7	2.8
1200	0.1	0.5	0.4	2.4
1400	0.7	0.3	0.2	1.9
1600	1.5	0.1	0.0	1.4
1800	2.4	0.5	0.1	0.9
2000	3.7	1.2	0.1	0.5

جدول(۴-۶) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEP)(۸۴٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.35(K) %Dev	T=377.15(K) %Dev	T=471.65(K) %Dev	T=575.15(K) %Dev
X_2=0.84				
0	0.9	1.2	0.8	13.7
200	0.2	0.3	1.0	3.3
400	0.2	0.3	1.4	2.0
600	0.5	0.1	1.3	3.4
800	0.5	0.3	1.1	3.6
1000	0.3	0.4	0.8	3.3
1200	0.0	0.4	0.5	2.9
1400	0.6	0.3	0.3	2.3
1600	1.3	0.0	0.1	1.8
1800	2.3	0.5	0.1	1.3
2000	3.5	1.1	0.1	0.8

جدول(۴-۷) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۱۴٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.75(K) %Dev	T=376.95(K) %Dev	T=451.95(K) %Dev	T=535.25(K) %Dev
X_2=0.14				
200	2.2	5.3	2.9	2.6
400	1.7	4.6	3.0	0.7
600	1.4	4.1	2.8	1.8
800	1.2	3.6	2.5	2.2
1000	1.2	3.2	2.3	2.2
1200	1.4	2.9	2.0	2.0
1400	1.7	2.5	1.8	1.7
1600	2.2	2.1	1.6	2.2
1800	2.8	1.9	1.5	1.1
2000	3.6	1.9	1.5	0.9

جدول (۴-۸) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEVA) (۱۸٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.15(K) %Dev	T=368.75(K) %Dev	T=449.95(K) %Dev	T=523.85(K) %Dev
X_2=0.18				
200	1.9	4.7	3.1	1.0
400	1.4	3.9	3.3	1.6
600	1.1	3.2	3.3	2.6
800	1.0	2.6	4.1	4.1
1000	1.0	3.1	2.8	2.8
1200	1.2	1.7	2.6	2.6
1400	1.6	1.4	2.4	2.4
1600	2.1	1.3	2.2	2.1
1800	2.7	1.4	2.1	1.8
2000	3.6	1.6	2.1	1.6

جدول (۴-۹) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۲۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=297.35(K) %Dev	T=376.75(K) %Dev	T=449.95(K) %Dev	T=531.75(K) %Dev
X_2=0.25				
200	1.7	3.5	1.8	1.9
400	1.2	3.1	2.2	1.3
600	0.9	2.7	2.3	2.5
800	0.7	2.4	3.3	0.9
1000	0.7	2.2	2.0	2.9
1200	0.9	2.6	1.8	2.7
1400	1.2	2.1	1.6	2.4
1600	1.7	2.2	1.5	2.1
1800	2.3	2.4	1.4	1.8
2000	3.1	2.7	1.2	1.6

جدول(۴-۱۰) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEVA) (۲۸٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.45(K) %Dev	T=376.85(K) %Dev	T=443.65(K) %Dev	T=526.85(K) %Dev
X_2=0.28				
200	0.5	2.1	0.7	2.8
400	0.0	1.9	1.1	0.3
600	0.3	1.5	1.1	1.4
800	0.5	1.3	1.0	1.8
1000	0.4	1.1	0.9	1.8
1200	0.2	1.1	0.7	1.7
1400	0.1	1.1	0.6	1.4
1600	0.5	1.1	0.5	1.1
1800	1.2	1.3	0.4	0.8
2000	2.0	1.7	0.5	0.6

جدول(۴-۱۱) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۳۳٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.75(K) %Dev	T=376.75(K) %Dev	T=443.55(K) %Dev	T=526.55(K) %Dev
X_2=0.33				
200	0.1	0.8	0.5	3.4
400	0.5	0.6	0.0	0.3
600	0.8	0.3	0.2	0.8
800	1.0	0.1	0.1	1.2
1000	0.9	0.0	0.0	1.3
1200	0.8	0.0	0.6	1.1
1400	0.5	0.0	0.3	0.8
1600	0.1	0.1	0.4	0.5
1800	0.1	0.2	0.1	1.3
2000	1.3	0.6	0.4	0.0

جدول(۴-۱۲) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEVA) (۴۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.85(K) %Dev	T=375.95(K) %Dev	T=441.05(K) %Dev	T=496.85(K) %Dev
X_2=0.40				
200	1.3	1.2	2.1	3.3
400	1.7	1.3	1.4	1.2
600	1.9	1.4	1.2	0.4
800	2.0	1.6	1.2	0.2
1000	2.0	1.6	1.2	0.6
1200	1.9	1.6	1.3	0.3
1400	1.6	1.6	1.4	0.5
1600	1.1	1.4	1.5	0.7
1800	0.5	1.2	1.5	0.9
2000	0.3	0.9	1.5	1.1

جدول(۴-۱۳) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEMA) (۴٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.05(K) %Dev	T=369.35(K) %Dev	T=450.55(K) %Dev	T=523.95(K) %Dev
X_2=0.04				
0	1.6	0.3	2.4	1.2
200	1.2	0.4	2.6	0.6
400	0.9	1.0	2.5	1.4
600	0.8	1.4	2.3	1.8
800	0.8	1.7	1.9	2.1
1000	1.0	1.9	1.6	2.0
1200	1.3	1.9	1.4	1.7
1400	1.9	1.9	1.1	1.2
1600	2.5	1.7	1.0	1.0
1800	3.3	1.4	0.9	0.7
2000	4.3	1.1	0.8	0.4

جدول(۴-۱۴) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEMA) (۹٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.05(K) %Dev	T=369.35(K) %Dev	T=450.55(K) %Dev	T=523.95(K) %Dev
X_2=0.09				
0	1.0	0.5	0.4	0.8
200	0.6	0.2	1.1	1.6
400	0.4	0.7	1.2	0.7
600	0.3	1.1	1.1	1.5
800	0.3	1.5	0.9	1.6
1000	0.6	1.7	0.7	1.5
1200	0.9	1.8	0.5	1.2
1400	1.4	1.7	0.3	0.9
1600	2.1	1.6	0.1	0.6
1800	2.9	1.4	0.1	0.3
2000	3.9	1.1	0.1	0.0

جدول(۴-۱۵) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEMA) (۱۱/۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.75(K) %Dev	T=368.15(K) %Dev	T=449.95(K) %Dev	T=524.65(K) %Dev
X_2=0.115				
0	0.5	0.4	0.7	0.3
200	0.1	0.4	0.2	2.3
400	0.1	1.0	0.5	0.1
600	0.1	1.4	0.5	1.0
800	0.1	1.7	0.4	1.2
1000	0.2	1.1	0.2	1.2
1200	0.2	1.6	1.1	2.8
1400	1.1	1.9	0.1	0.7
1600	1.7	1.7	0.2	0.4
1800	2.6	1.5	0.3	0.1
2000	3.6	1.1	0.3	0.1

جدول(۴-۱۶) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEMA) (۱۲٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=295.05(K) %Dev	T=369.65(K) %Dev	T=450.55(K) %Dev	T=524.15(K) %Dev
X_2=0.12				
0	0.9	1.7	0.7	2.3
200	0.5	0.8	0.2	2.1
400	0.3	0.1	0.5	0.3
600	0.2	0.4	0.5	1.1
800	0.2	0.8	0.4	1.3
1000	0.5	1.1	0.2	1.2
1200	0.8	1.3	0.0	1.0
1400	1.4	1.4	0.2	0.7
1600	2.0	1.3	0.3	0.4
1800	2.8	1.1	0.4	0.1
2000	3.8	0.8	0.3	0.2

جدول(۴-۱۷) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEMA) (۱۵٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=297.65(K) %Dev	T=368.35(K) %Dev	T=450.05(K) %Dev	T=524.75(K) %Dev
X_2=0.15				
0	0.0	0.3	2.1	3.8
200	0.4	0.3	0.9	3.1
400	0.6	0.8	0.5	0.5
600	0.6	1.2	0.4	0.4
800	0.6	1.5	0.4	0.7
1000	0.3	1.7	0.6	0.6
1200	0.0	1.8	0.7	0.4
1400	0.5	1.8	0.9	0.2
1600	1.2	1.7	1.0	0.1
1800	2.0	1.5	1.0	0.4
2000	3.0	1.2	0.9	0.7

جدول(۴-۱۸) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEMA) (۲۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=295.45(K) %Dev	T=369.55(K) %Dev	T=450.55(K) %Dev	T=523.95(K) %Dev
X_2=0.20				
0	0.8	0.5	4.1	5.0
200	1.2	1.0	2.7	4.3
400	1.4	1.3	2.1	1.2
600	1.4	1.6	1.9	0.7
800	1.3	1.9	1.9	0.4
1000	1.0	2.1	2.0	0.4
1200	0.6	2.2	2.1	0.6
1400	0.1	2.3	2.2	0.8
1600	0.6	2.2	2.3	1.1
1800	1.4	2.1	2.3	1.4
2000	2.4	1.8	2.3	1.7

جدول(۴-۱۹) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر (PEAA) (۹٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=296.15(K) %Dev	T=370.25(K) %Dev	T=440.45(K) %Dev	T=515.55(K) %Dev
X_2=0.09				
200	1.4	1.3	1.1	2.0
400	1.1	0.6	1.4	0.2
600	0.9	0.1	1.4	1.1
800	0.9	0.4	1.3	1.5
1000	1.0	0.7	1.1	1.8
1200	0.0	1.0	1.0	1.4
1400	1.6	0.4	1.3	1.4
1600	2.1	1.1	0.7	1.0
1800	2.7	1.0	0.6	0.8
2000	2.6	0.9	1.0	1.5

جدول(۴-۲۰) میزان برخی از انحرافات محاسبه شده دانسیته کوپلیمر(PEAA) (۱۰٪) در دماها و فشارهای مختلف با استفاده از معادله حالت TM تصحیح شده از داده‌های تجربی[۶۵].

P(bar)	T=297.95(K) %Dev	T=368.55(K) %Dev	T=450.75(K) %Dev	T=525.75(K) %Dev
X_2=0.10				
200	1.5	1.0	1.3	2.6
400	1.2	0.4	1.6	0.4
600	1.0	0.1	1.7	1.6
800	1.0	0.4	1.6	2.0
1000	1.1	0.6	1.5	2.1
1200	1.3	0.8	1.3	2.0
1400	1.7	0.8	1.2	1.8
1600	2.2	0.8	1.1	1.6
1800	2.8	0.6	1.0	1.4
2000	3.6	0.3	1.0	1.1