

...

1.2.1

دانشگاه یزد
دانشکده علوم
گروه شیمی

پایان نامه
برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
شیمی فیزیک

ارائه یک معادله حالت برای سیالات زنجیری ناجورهسته سخت و مخلوط شامل
مولکول‌های زنجیری جورهسته سخت با پتانسیل جاذبه متغیر

استاد راهنما: دکتر حسین فرخ پور

استاد مشاور: دکتر محمد رضا نوربالا

۳۳۸۸ / ۷ / ۱

پژوهش و نگارش: انسیه مجتبایی

استاد اطلاعات مرکز علمی یزد
تسلیه بزرگ

دی ماه ۱۳۸۲

۱۲۷۰۱۰

به نشانه‌ی سپاسی خالصانه

تقدیم به

مالک هستی

که مراد دامن دو فرشته نهادتا
پدر سالار صبرم باشد و مادر کنجینه‌ی مهرم
و در کنارم بهدلی قرار دادتا
چراغ باغ زندگی ام را روشن کند

بنام مالک نامید و هور که هر چه داریم از لطف بی انتهای اوست

شکر از مخلوق شکر از خالق است «قرآن مجید»

جبین پاس بر آستان کبریایش می سایم که مراد سیمودن مسیر تلاطم علم و دانش یاری نمود.

حال که با استعانت خداوند متعال کار نگارش پایان نامه به اتمام رسید، بر خود لازم می دانم، از کلیه کسانی که در

به ثمر رسیدن این پژوهش مرایاری نمودند شکر و قدر دانی کنم.

از زحمات بی دریغ استاد راهنمای ارجمندم جناب آقای «دکتر حسین فرخ پور» که سیمودن این مسیر بدون

راهنمایی های ارزنده و ارزشمند ایشان ممکن نبود خالصانه سپاسگزاری می کنم.

باتقدیر و شکر از استاد مشاور گرامی جناب آقای دکتر محمد رضا نوربالا که بنده را مورد بذل عنایت خود قرار

دادند.

از جناب آقایان دکتر محسن وفایی و دکتر انصاری پور که داوری خارجی و داخلی پایان نامه مرا بر عهده داشتند

صمیمانه سپاسگزارم.

از پدر و مادر عزیزم که سرمایه و عمر جوانی خود را هزینه ام نمودند خاضعانه شکر و قدردانی می‌نمایم.

از مهدی عزیزم که بی‌شک یی نمودن مسیر زندگی ام بی‌همراهی او ممکن و مسیر نیست صمیمانه شکر می‌نمایم.

از کلیه اساتیدی که در دوره کارشناسی و کارشناسی ارشد از محضر آنان کسب فیض نمودم شکر و قدردانی

می‌نمایم.

و از کلیه دوستان.....



مدیریت تحصیلات تکمیلی

صور تجلسه دفاعیه پایان نامه دانشجوی
دوره کارشناسی ارشد

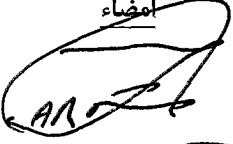

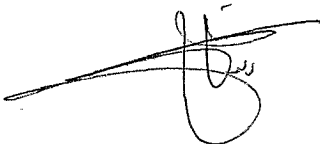

شناسه: ب/ک/۳

جلسه دفاعیه پایان نامه تحصیلی خانم انسیه مجتبائی دانشجوی کارشناسی ارشد رشته /گرایش:

شیمی / شیمی فیزیک

تحت عنوان: ارائه یک معادله حالت برای سیالات زنجیری ناجور هسته سخت و مخلوط شامل مولکول‌های زنجیری جور هسته سخت با پتانسیل جاذبه متغیر

و تعداد واحد: ۸ در تاریخ ۱۳۸۷/۱۰/۱۰ با حضور اعضای هیأت داوران (به شرح ذیل) تشکیل گردید.
پس از ارزیابی توسط هیأت داوران، پایان‌نامه با نمره: به عدد ۱۹/۷۴ به حروف نوزده و هفتاد و چهارصدم و درجه عالی مورد تصویب قرار گرفت.

عنوان	نام و نام خانوادگی	امضاء
استاد / استادان راهنما:	دکتر حسین فرخ‌پور	
استاد / استادان مشاور:	دکتر محمدرضا نوربالا	
متخصص و صاحب‌نظر داخلی:	دکتر قاسم انصاری‌پور	
متخصص و صاحب‌نظر خارجی:	دکتر محسن وفائی	

نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه (ناظر)

نام و نام خانوادگی: دکتر عباس بهجت

امضاء:



چکیده

در این پایان نامه یک معادله حالت تحلیلی اختلالی ارائه شده برای سیالات شامل مولکول‌های زنجیری جورهسته با پتانسیل مکان- مکان دارای شاخه دافعه کره سخت به مخلوط سیالات زنجیری جورهسته و سیالات دارای مولکول‌های زنجیری ناجورهسته بسط داده می‌شود. در این پژوهش سیالات زنجیری سختی مورد نظر هستند که در آن‌ها مولکول‌های زنجیری سخت شبیه گردن‌بند مروارید با کره‌های آزادانه متصل شده هستند که از طریق پتانسیل بین‌مولکولی مکان-مکان چاه مربعی و پتانسیل یوکاوا با هم برهم‌کنش می‌کنند. قواعد اختلاط تک‌سیال وان‌دروالس برای تقریب زدن ساختار متوسط مخلوط و پارامترهای اختلال مخلوط استفاده می‌شود. سپس این معادله حالت جدید برای مخلوط به سیالات حاوی مولکول‌های زنجیری ناجورهسته بسط داده می‌شود. ضرایب تراکم‌پذیری مخلوط‌های مختلف و سیالات زنجیری ناجورهسته سخت از قبیل دسته‌ای، متناوب و نامرتب محاسبه شده در این پژوهش با نتایج شبیه‌سازی‌های مولکولی و نیز معادلات حالت معروف مقایسه شده است.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

۱.....	فصل اول: مقدمه‌ای بر مباحث نظری
۲.....	۱-۱- نیروهای بین‌مولکولی
۲.....	۱-۱-۱- نیروهای دوقطبی-دوقطبی
۳.....	۲-۱-۱- نیروهای پراکندگی (لاندن)
۴.....	۳-۱-۱- پیوند هیدروژنی
۴.....	۲-۱- پتانسیل‌های بین‌مولکولی
۵.....	۱-۲-۱- پتانسیل کره سخت
۵.....	۲-۲-۱- پتانسیل چاه مربعی
۶.....	۳-۲-۱- پتانسیل لنارد- جونز
۷.....	۴-۲-۱- پتانسیل یوکاوا
۹.....	۳-۱- معادله حالت
۱۲.....	۱-۳-۱- استخراج معادله حالت از روش مکانیک آماری
۱۵.....	۴-۱- تابع توزیع شعاعی
۲۰.....	۱-۴-۱- ارتباط توابع ترمودینامیکی با $g(r)$
۲۲.....	۵-۱- نظریه اختلال مایعات
۲۲.....	۱-۵-۱- نظریه اختلال زوانزیگ
۲۵.....	۲-۵-۱- نظریه اختلال بارکر- هندرسون
۲۹.....	۶-۱- مخلوط

۱-۶-۱- قواعد اختلاط	۲۹
۱-۶-۲- قواعد ترکیب	۳۱
فصل دوم: مروری بر معادلات حالت ارائه شده برای مخلوط سیالات زنجیری جورهسته سخت	۳۲
۱-۲- معادلات حالت برای مولکول‌های زنجیری	۳۳
۱-۱-۲- نظریه آماری سیال تجمعی سخت (SAFT)	۳۳
۲-۱-۲- نظریه آماری سیالات تجمعی با طول پتانسیل جاذبه متغیر (SAFT-VR)	۳۵
۳-۱-۲- نظریه اختلال ترمودینامیکی (TPT)	۳۷
۴-۱-۲- نظریه اختلال ترمودینامیکی دimer (TPT-D)	۳۸
۵-۱-۲- نظریه‌های GF دیکمن و هال و GF-D هائل- هال	۴۰
۶-۱-۲- معادله حالت گولانی و هال برای سیالات دimer چاه مربعی	۴۲
۷-۱-۲- معادله حالت سادوفسکی و همکاران	۴۷
فصل سوم: ارائه معادله حالات برای سیالات زنجیری ناجورهسته سخت و مخلوط سیالات زنجیری	
جورهسته سخت	۵۳
۱-۳- مقدمه	۵۴
۲-۳- معادله حالت برای سیالات تک‌اتمی	۵۵
۳-۳- مخلوط‌ها و انواع سیستم‌های ناجورهسته	۵۷
۴-۳- معادله حالت برای سیالات شامل مولکول‌های زنجیری جورهسته	۵۹
۵-۳- معادله حالت جدید برای مخلوط سیالات حاوی مولکول‌های زنجیری جورهسته سخت ..	۶۱

- ۳-۶- معادله حالت جدید برای سیالات حاوی مولکول‌های زنجیری ناجورهسته سخت ۶۶
- ۳-۷- مقایسه بین پیش‌بینی‌های نظری معادلات حالت به دست آمده با نتایج شبیه‌سازی
دینامیک مولکولی و معادلات حالت شناخته شده ۷۰
- ۳-۷-۱- پتانسیل چاه مربعی ۷۰
- ۳-۷-۱-۱- تأثیر عمق چاه پتانسیل بر ضریب تراکم‌پذیری مخلوط سیالات زنجیری
جورهسته سخت ۷۱
- ۳-۷-۱-۲- تأثیر عمق و پهنای چاه پتانسیل بر ضریب تراکم‌پذیری سیالات زنجیری
ناجورهسته سخت ۷۲
- ۳-۷-۲- پتانسیل یوکاوا ۷۴
- ۳-۸- بحث و نتیجه‌گیری ۷۸

فهرست شکل‌ها

صفحه

عنوان

- شکل (۱-۱) پتانسیل برهم‌کنش بین دو مولکول بر اساس مدل‌های مختلف: (الف) کره سخت، (ب) چاه مربعی، (ج) پتانسیل لِنارد-جونز، (ح) پتانسیل یوکاوا..... ۹
- شکل (۲-۱) (الف) ضرایب تراکم‌پذیری برخی گازها در دمای صفر درجه سانتی‌گراد (ب) ضرایب تراکم‌پذیری متان در چندین دما..... ۱۱
- شکل (۳-۱) ضریب ساختار $\hat{h}(s)$ به عنوان تابعی از بردار موجی $k\sigma$ ۱۵
- شکل (۴-۱) نمایش چگونگی پراکندگی مولکول‌ها حول یک مولکول مرکزی در یک سیال..... ۱۶
- شکل (۵-۱) تابع توزیع شعاعی به دست آمده از نتایج محاسبات دینامیک مولکولی برای سیال لِنارد-جونز (۶-۱۲)..... ۲۰
- شکل (۶-۱) مقایسه نتایج به دست آمده از معادله (۴۸-۱) (خطوط صاف) با نتایج دینامیک مولکولی و شبیه‌سازی مونت کارلو (نقاط)..... ۲۹
- شکل (۱-۳) مخلوط سیال زنجیری جورهسته سخت..... ۵۸
- شکل (۲-۳) سه نوع مولکول زنجیری ناجور هسته سخت (الف) - زنجیر متناوب (ب) - زنجیر دسته‌ای (ج) - زنجیر نامرتب..... ۵۸
- شکل (۳-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده از طریق معادله حالت ارائه شده با نتایج DCMD گولاتی - هال برای مخلوط‌های دواتمی جورهسته چاه مربعی..... ۹۱

- شکل (۴-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده از طریق معادله حالت ارائه شده با پیش‌بینی‌های معادله حالت سادوفسکی برای مخلوط‌های چاه مربعی تریمر،
- ۹۲ ترامر و اکتامر
- شکل (۵-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده از طریق معادله حالت ارائه شده با نتایج دینامیک مولکولی گولاتی- هال DCMD برای سیال دیمر ناجورهسته
- ۹۳ چاه مربعی
- شکل (۶-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده از طریق معادله حالت ارائه شده با نتایج شبیه‌سازی NpT-MC از مرجع [۴۸] برای سیال دیمر ناجورهسته چاه مربعی....
- ۹۴ شبیه‌سازی NpT-MC از مرجع [۴۸] برای سیال دیمر ناجورهسته چاه مربعی....
- شکل (۷-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری از معادله حالت ارائه شده با نتایج دینامیک مولکولی گولاتی- هال DCMD در دمای $T^* = 3$ برای (a) سیال زنجیری ناجورهسته
- ۹۵ دسته‌ای چاه مربعی (b) سیال زنجیری ناجورهسته متناوب چاه مربعی
- شکل (۸-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده از معادله حالت ارائه شده با نتایج دینامیک مولکولی برای مخلوط مونومر یوکاوا.....
- ۹۶ دینامیک مولکولی برای مخلوط مونومر یوکاوا.....

فهرست جدول‌ها

صفحه	عنوان
۴۳	جدول (۱-۲) پارامترهای هندسی بدنه‌های محدب.....
۴۵	جدول (۲-۲) ضرایب بسط چند جمله‌ای $I_0^{\text{dim}} = \sum_{k=0} c_k \eta^k$
	جدول (۳-۲) ثابت‌های معادله (۲-۹۹) برای انتگرال‌های $I_1(\eta, m)$ و $I_2(\eta, m)$ سیال زنجیری
۵۱	چاه مربعی.....
	جدول (۱-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده برای مخلوط‌های مونومر چاه مربعی در دمای کاهش‌یافته $T^* = 2$ ، $\varepsilon_{22} / \varepsilon_{11} = 1/5$ و $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \lambda_{12} = 1/5$ ، با
۸۰	نتایج شبیه‌سازی مونت کارلو و نتایج ارائه شده در مراجع [۴۸] و [۴۷].....
	جدول (۲-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده مخلوط‌های دواتمی جورهسته چاه مربعی در دمای $T^* = 2$ و $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \lambda_{12} = 1/5$ ، با پیش‌بینی‌های ضریب تراکم‌پذیری نظریه اختلال گولاتی- هال، نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۸۱	کانونیکال (DCMD) گولاتی- هال و معادله حالت سادوفسکی.....
	جدول (۳-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده مخلوط‌های دواتمی جورهسته در دمای $T^* = 3$ و $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \lambda_{12} = 1/5$ ، با پیش‌بینی‌های ضریب تراکم‌پذیری نظریه اختلال گولاتی- هال، نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (DCMD) و
۸۲	معادله حالت سادوفسکی.....

جدول (۳-۴) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده سیال دایمر ناجورهسته چاه مربعی در

دو دمای کاهش‌یافته $T^* = 2$ ، $T^* = 3$ و $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \lambda_{12} = 1/5$ ، با

پیش‌بینی‌های ضریب تراکم‌پذیری نظریه اختلال گولاتی- هال و نتایج دینامیک

مولکولی (DCMD) ۸۳

جدول (۳-۵) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده سیالات زنجیری ناجورهسته دسته‌ای

چاه مربعی در دمای $T^* = 3$ و $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \lambda_{12} = 1/5$ ، با نتایج ضریب

تراکم‌پذیری از محاسبات دینامیک مولکولی گولاتی- هال (EGFD) و نظریه

بسط داده شده فلوری دایمر گولاتی- هال (DCMD) ۸۴

جدول (۳-۶) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده سیالات زنجیری ناجورهسته متناوب

چاه مربعی در دمای $T^* = 3$ و $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \lambda_{12} = 1/5$ ، با نتایج ضریب

تراکم‌پذیری از محاسبات دینامیک مولکولی گولاتی- هال و نظریه بسط داده

شده فلوری دایمر گولاتی- هال ۸۶

جدول (۳-۷) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده سیالات زنجیری ناجورهسته نامرتب

چاه مربعی در دمای $T^* = 3$ و $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \lambda_{12} = 1/5$ ، با نتایج ضریب

تراکم‌پذیری از محاسبات دینامیک مولکولی گولاتی- هال و نظریه بسط داده

شده فلوری دایمر گولاتی- هال ۸۸

جدول (۸-۳) ضریب تراکم‌پذیری مخلوط‌های دیمر یوکاوا، مخلوط‌های تترامر و اکتامر یوکاوا

به ترتیب در دماهای کاهش یافته $T^* = 3$ و ۴ و ۸. طول پوششی دنباله یوکاوا

برابر ۱/۸ می‌باشد..... ۸۹

جدول (۹-۳) ضریب تراکم‌پذیری مخلوط‌های دیمر ناجورهسته یوکاوا، در دو دمای

کاهش یافته ۳ و $T^* = 2$. طول پوششی دنباله یوکاوا برابر ۱/۸ می‌باشد..... ۹۰

فصل اول

مقدمه‌ای بر مباحث نظری

۱-۱- نیروهای بین مولکولی

نیروهای بین مولکولی نقش مهمی در شکل‌گیری ساختار مواد مختلف دارند و بر اساس نوع نیروهایی که در بین مولکول‌های مختلف وجود دارد، ماده را به سه حالت گاز، جامد و مایع تقسیم‌بندی می‌کنند. در برخی از حالت‌ها این نیروها به قدری ضعیف عمل می‌کنند که می‌توان از آن‌ها صرف‌نظر کرد ولی در برخی دیگر اهمیت نیروهای بین مولکولی به اندازه‌ای است که نمی‌توان از آن‌ها چشم‌پوشی کرد و برهم‌کنش میان مولکول‌ها مهم است. در حقیقت بسیاری از خواص ماده به چنین برهم‌کنش‌هایی وابسته است.

اولین بار وان‌دروالس^۱ در سال ۱۸۷۳ وجود نیروهای جاذبه بین‌مولکولی در میان مولکول‌های گاز را مطرح کرد. به نظر وان‌دروالس، مجموع این نیروها باعث انحراف خواص یک گاز حقیقی^۲ از گاز ایده‌آل^۳ می‌شوند. توضیح منشأ این نیروها توسط فریتز لاندن^۴ در سال ۱۹۳۰ ارائه شد. این نیروها عبارتند از الف) نیروهای دوقطبی- دوقطبی که بین مولکول‌های دارای دوقطبی دائمی وجود دارد. این نیروها ناشی از جاذبه متقابل بین قطب‌های مثبت و منفی مولکول‌ها است. ب) نیروهای لاندن که ناشی از دوقطبی‌های لحظه‌ای حاصل از حرکت الکترون‌ها در مولکول است. ج) پیوند هیدروژنی که نوعی نیروی بین‌مولکولی قوی و غیرعادی بین یک اتم هیدروژن با یک اتم کوچک با الکترون‌خواهی زیاد است. نیروهای بین‌مولکولی موجود بین مولکول‌ها یا اتم‌ها معمولاً به اندازه پیوندهای کووالانسی یا یونی قوی نیستند، زیرا در این برهم‌کنش‌ها اتم‌ها یا مولکول‌ها با یکدیگر الکترون مبادله نمی‌کنند یا به اشتراک نمی‌گذارند. نیروهای دوقطبی- دوقطبی و لاندن را معمولاً نیروهای وان‌دروالسی می‌نامند که در زیر توضیح داده خواهد شد [۱].

¹ Van der Waals

² Real gas

³ Ideal gas

⁴ Fritz London

۱-۱-۱- نیروهای دوقطبی - دوقطبی

منشأ این نیروهای بین‌مولکولی جاذبه متقابل بین قطب‌های مخالف مولکول‌های قطبی هم‌جوار است. این گونه مولکول‌ها دارای دوقطبی دائمی هستند و تمایل دارند در راستای میدان الکتریکی قرار گیرند. هر اندازه مولکول‌ها از یکدیگر دورتر باشند، نیروهای دوقطبی- دوقطبی هم ضعیف‌تر هستند. از این رو، مولکول‌های قطبی بزرگ که نمی‌توانند زیاد به یکدیگر نزدیک شوند، نسبت به مولکول‌های کوچک‌تر، نیروهای جاذبه ضعیف‌تری بر یکدیگر وارد می‌کنند. مقادیر الکترون‌خواهیته^۱ را می‌توان برای پیشگویی میزان قطبیت مولکول‌های دو اتمی و نیز، طبیعت قطب‌های مثبت و منفی به کار برد. اما پیشگویی قطبیت مولکول‌هایی که بیش از دو اتم دارند، مبتنی بر شناخت شکل هندسی مولکول و آرایش زوج الکترون‌های ناپیوندی است [۱].

۱-۱-۲- نیروهای پراکندگی^۲ (لاندن):

مولکول‌های غیرقطبی دوقطبی دائمی ندارند ولی با این وجود، تمام گازها شامل مولکول‌های غیرقطبی را می‌توان مایع کرد. از این رو، علاوه بر نیروهای دوقطبی- دوقطبی، باید نوع دیگری از نیروی بین‌مولکولی وجود داشته باشد. وجود نیروهای پراکندگی در مولکول‌ها به عنوان یک اصل پذیرفته شده است. این نیروها بر اثر جاذبه بین دوقطبی‌های لحظه‌ای پدید می‌آیند و دوقطبی‌های لحظه‌ای نیز به نوبه خود از حرکت الکترون‌ها در اتم و مولکول ناشی می‌شوند. در یک لحظه، ابر الکترونی یک مولکول چنان تغییر شکل می‌دهد که دو قطبی لحظه‌ای به وجود می‌آورد و این پدیده سبب می‌شود که قسمتی از مولکول به مقدار جزئی منفی‌تر از قسمت‌های دیگر شود. در لحظه بعد، به علت حرکت الکترون‌ها جای قطب‌های مثبت و منفی عوض می‌شود. اثر این دوقطبی‌های لحظه‌ای، در طول زمان کوتاه یکدیگر را حذف می‌کنند به نحوی که مولکول غیرقطبی فاقد گشتاور دوقطبی دائمی می‌شود. دوقطبی‌های لحظه‌ای متغیر یک مولکول،

^۱ Electronegativity

^۲ Dispersion

دوقطبی‌های نظیر خود را در مولکول‌های مجاور القا می‌کنند و باعث ایجاد نیروهای جاذبه بین این دوقطبی‌های لحظه‌ای می‌شود که جاذبه لاندن نامیده می‌شوند. قویترین نیروهای لاندن، بین مولکول‌های بزرگ ایجاد می‌شود که ابر الکترونی وسیع دارند و به سهولت تغییر شکل داده یا قطبی می‌شوند. نیروهای لاندن بین مولکول‌های قطبی نیز وجود دارد ولی در مورد ترکیبات مولکولی غیرقطبی، نیروهای لاندن تنها نیروی جاذبه بین مولکولی موجود است [۱].

۱-۱-۳- پیوند هیدروژنی

پیوند هیدروژنی نوعی نیروی جاذبه بین مولکولی است که بین اتم هیدروژن از یک مولکول با اتم‌های الکترون‌گاتیو فلوئور، اکسیژن و نیتروژن از مولکول دیگر به وجود می‌آید. در این جا، هیدروژن به عنوان پلی بین دو اتم الکترون‌گاتیو عمل می‌کند. انرژی لازم برای شکستن یک مول پیوند هیدروژنی از حدود ۱ تا ۱۰ کیلوکالری متغیر است.

گرچه پیوندهای هیدروژنی ضعیف‌تر از پیوندهای کووالانسی هستند، اما در میان نیروهای بین مولکولی قویترین آن‌ها به شمار می‌روند. پیوندهای هیدروژنی نقش مؤثری در ساختار مواد مهم بیولوژیکی دارای پیوندهای N-H و O-H و تعیین خواص آن‌ها دارند. شکل هندسی پروتئین‌ها و اسیدهای نوکلئیک که مولکول‌های آلی دارای زنجیر بلند هستند، با پیوند هیدروژنی میان گروه‌های N-H یک زنجیر و گروه C=O زنجیر مجاور تثبیت می‌شود [۱].

۱-۲- پتانسیل‌های بین مولکولی

نیروهای بین مولکولی اهمیت اساسی در تعیین بسیاری از خواص توده ماده دارند. با در دست داشتن یک پتانسیل بین مولکولی دقیق و نظریه‌هایی که این پتانسیل را به خواص مختلف

سیستم ارتباط می‌دهند می‌توان این خواص را با صحت خوبی محاسبه نمود. از این رو به معرفی برخی پتانسیل‌های بین مولکولی که در این پایان‌نامه از آن‌ها استفاده شده است می‌پردازیم [۲].

۱-۲-۱- پتانسیل کره سخت^۱

پتانسیل کره سخت از این قرار است:

$$u(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases} \quad (1-1)$$

که σ قطر مولکولی است. بر اساس این مدل دو مولکول تا زمانی که از هم دور باشند و بر هم مماس نشوند انرژی برهم‌کنش ندارند ولی به محض تماس آن دو، پتانسیل با شیب نامحدود افزایش می‌یابد. شکل (۱-۱-الف) [۲].

۱-۲-۲- پتانسیل چاه مربعی^۲

این پتانسیل ساده‌ترین مدلی است که هم اندازه مولکول و هم سهم جاذبه در آن منظور شده است. شکل ریاضی این مدل پتانسیل چنین است:

$$u(r) = \begin{cases} \infty & r < \sigma \\ -\varepsilon & \sigma < r < \lambda\sigma \\ 0 & r > \lambda\sigma \end{cases} \quad (2-1)$$

¹ Hard Sphere

² Square-Well