

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

گرایش حالت جامد

شبیه سازی جذب دینامیکی گاز روی جاذب های با بستر ثابت کربنی

از:

مهدی برزویی

استاد راهنما:

دکتر مجید سیفی

دی ۱۳۹۰

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم

برادر و خواهران مهربانم

که همواره پشتیبانم بوده اند

اکنون که با لطف و مهربانی خداوند موفق به گذراندن این دوره از تحصیل و نگارش این پایان نامه شدم بر خود لازم می دانم تشکر و سپاسگذاری خود را نثار کسانی کنم که در طی این مسیر از راهنمایی، پشتیبانی و کمک هایشان بهره بردم.

در ابتدا از خانواده عزیزم که همواره در طول زندگی از حمایت های بی دریغشان برخوردار بوده ام و پیوسته مشوق من در فراگیری علم و دانش بوده اند تشکر و سپاسگذاری می کنم.

از استاد گرامی جناب آقای دکتر سیفی که را هنمایی این پایان نامه را بر عهده داشته اند و همواره با کمک های ارزنده و بی دریغ خود مرا یاری نموده اند بی نهایت سپاسگزارم.

از جناب آقای دکتر روضاتی و آقای دکتر مهدوی فر به خاطر قبول زحمت داوری این پایان نامه کمال تشکر را دارم.

از تمامی دوستان و همکلاسی های خوبم به خصوص هم خوابگاهی های عزیزم در خوابگاه یخ سازی تشکر و قدردانی میکنم.

صفحه	عنوان
چ	فهرست شکل ها
د	فهرست جداول
ذ	چکیده فارسی
ر	چکیده انگلیسی
۱	مقدمه
	فصل اول جذب سطحی
۴	۱-۱ مقدمه
۵	۲-۱ انواع جذب سطحی
۶	۳-۱ نیروها و انرژی های دخیل در جذب سطحی
۸	۴-۱ ایزوترم جذب
۹	۵-۱ معادله کلوین
۱۰	۶-۱ چگالش مویینگی
۱۱	۷-۱ حلقه پسماند
۱۲	۸-۱ مدل های ریاضی ایزوترم جذب
۱۲	۱-۸-۱ ایزوترم لانگمیر
۱۴	۲-۸-۱ قانون هنری
۱۵	۳-۸-۱ ایزوترم فروندلیش
۱۶	۴-۸-۱ ایزوترم BET
۱۹	۹-۱ جاذب ها
۲۰	۱۰-۱ کربن فعال
۲۰	۱-۱۰-۱ مراحل تولید
۲۱	۲-۱۰-۱ کربن های فعال پیشرفته

۲۱	غربال مولکولی کربنی (CMS)	۱-۲-۱۰-۱
۲۲	الیاف کربن فعال	۲-۲-۱۰-۱
	<b>فصل دوم سینتیک جذب</b>	
۲۴	مقدمه	۱-۲
۲۵	انتقال جرم	۲-۲
۲۵	انتقال جرم در جامدهای متخلخل	۳-۲
۲۶	انتقال جرم داخلی	۴-۲
۲۶	قانون اول فیک	۱-۴-۲
۲۸	نفوذ نودسن	۲-۴-۲
۲۹	نفوذ مولکولی	۳-۴-۲
۳۱	ترکیب نفوذ نودسن و نفوذ مولکولی	۴-۴-۲
۳۲	ضریب نفوذ موثر	۵-۴-۲
۳۳	نفوذ سطحی	۶-۴-۲
۳۶	جریان پوازوی	۷-۴-۲
۳۷	انتقال جرم خارجی	۵-۲
	<b>فصل سوم جاذب های با بستر ثابت</b>	
۳۹	مقدمه	۱-۳
۳۹	بسترهای ثابت جذب	۲-۳
۴۱	طراحی بسترهای ثابت، عملیات در شرایط هم دما	۳-۳
۴۳	تاثیر شکل ایزوترم بر روی ناحیه انتقال جرم	۴-۳
۴۵	سیستم هم دما تئوری تعادل	۵-۳
۴۶	سیستم هم دما، مقاومت انتقال جرم محدود	۶-۳
۵۰	LUB بستر	۷-۳

## فصل چهارم شبیه سازی منحنی شکست بستر و بررسی تاثیر پارامترهای مختلف بر روی آن

۵۳	تقریب LDF	۱-۴
۵۴	روش شبیه سازی	۲-۴
۵۵	شبیه سازی جذب $CO_2$ بر روی غربال مولکولی کربنی (CMS)	۳-۴
۵۶	مدل ریاضی	۱-۳-۴
۶۰	نتایج و بحث	۲-۳-۴
۶۱	بررسی تاثیر طول	۱-۲-۳-۴
۶۳	اثر تغییر فشار (غلظت ورودی)	۲-۲-۳-۴
۶۵	اثر تغییر ضریب تخلخل بستر	۳-۲-۳-۴
۶۷	اثر آهنگ شارش گاز	۴-۲-۳-۴
۷۰	اثر تغییر ضریب پراکندگی	۵-۲-۳-۴
۷۲	تاثیر میزان غیر خطی بودن ایزوترم	۶-۲-۳-۴
۷۶	شبیه سازی جذب $CO_2$ و $CH_4$ بر روی کربن فعال	۴-۴
۷۷	نتایج و بحث	۱-۴-۴
۷۷	شبیه سازی منحنی شکست $CO_2$ و مقایسه آن با منحنی شکست $CH_4$	۲-۱-۴-۴
۷۹	اثر دما بر روی منحنی شکست	۳-۱-۴-۴
۸۴	نتیجه گیری	
۸۶	پیشنهاد برای ادامه کار	
۸۸	مراجع	

- شکل ۱-۱: فرآیند جذب سطحی در یک جامد ۴
- شکل ۱-۲: دسته بندی انواع ایزوترم ۸
- شکل ۱-۳: انواع حلقه های پسماند ۱۲
- شکل ۱-۴: تغییر میزان خطی بودن ایزوترم فروندلیش با تغییر  $n$  ۱۵
- شکل ۱-۵: جذب چند لایه در مدل BET ۱۶
- شکل ۱-۲: مراحل مختلف جذب در یک جاذب ۲۴
- شکل ۲-۲: نفوذ در یک بعد ۲۷
- شکل ۳-۲: مکانیزم نفوذ نودسن ۲۸
- شکل ۴-۲: مکانیزم نفوذ مولکولی ۳۰
- شکل ۵-۲: منافذ در محیط متخلخل ۳۲
- شکل ۶-۲: مکانیزم نفوذ سطحی ۳۳
- شکل ۷-۲: توزیع انرژی پتانسیل جذب روی سطح جاذب ۳۴
- شکل ۸-۲: مکانیزم جریان پوازوی ۳۶
- شکل ۱-۳: شکل بستر جذب ۳۹
- شکل ۲-۳: حرکت ناحیه انتقال جرم در طول بستر ۴۰
- شکل ۳-۳: (الف) گسترش جبهه غلظت (ناحیه انتقال جرم) در طول بستر (ب) منحنی شکست بستر ۴۱
- شکل ۴-۳: المان بستر ۴۲
- شکل ۵-۳: انواع ایزوترم از نظر نوع انحنا ۴۴
- شکل ۶-۳: تاثیر نوع ایزوترم بر شکل ناحیه انتقال جرم. (الف) ایزوترم نامطلوب. (ب) ایزوترم خطی. (پ) ایزوترم مطلوب ۴۴
- شکل ۷-۳: (الف) جبهه غلظت برای ایزوترم نامطلوب. (ب) جبهه غلظت برای ایزوترم مطلوب ۴۶
- شکل ۸-۳: منحنی شکست بخار آب برای طول های (بی بعد) مختلف (الف) منحنی تجربی (ب) منحنی شبیه سازی شده ۴۹



- شکل ۳-۹: (الف) منحنی شکست و (ب) ناحیه انتقال جرم درون بستر  
۵۰
- شکل ۴-۱: منحنی شکست شبیه سازی شده جذب  $CO_2$  بر روی CMS  
۶۰
- شکل ۴-۲: اثر افزایش طول بستر بر منحنی شکست  
۶۱
- شکل ۴-۳: جبهه غلظت برای بسترهایی با طول هایی برابر با (الف) ۱۰ سانتیمتر (ب) ۲۵ سانتیمتر (پ) ۵۰ سانتیمتر (ت) ۷۰ سانتیمتر  
۶۲
- شکل ۴-۴: اثر تغییر فشار (بر حسب atm) بر منحنی شکست  
۶۴
- شکل ۴-۵: اثر تغییر فشار (غلظت ورودی) بر روی جبهه غلظت (الف) ۰/۱ اتمسفر (ب) ۰/۵ اتمسفر (پ) ۱/۵ اتمسفر (ت)  
۶۵
- شکل ۴-۶: اثر تغییر تخلخل بستر بر منحنی شکست  
۶۶
- شکل ۴-۷: اثر تغییر ضریب تخلخل بر روی جبهه غلظت (الف) ۰/۵ (ب) ۰/۶ (پ) ۰/۷ (ت) ۰/۸  
۶۷
- شکل ۴-۸: تاثیر تغییر آهنگ شارش بر منحنی شکست  
۶۸
- شکل ۴-۹: اثر تغییر آهنگ شارش (بر حسب  $cm^3/min$ ) بر روی جبهه غلظت (الف) ۶ (ب) ۱۰ (پ) ۱۶ (ت) ۲۶  
۶۹
- شکل ۴-۱۰: اثر پراکندگی محوری بر روی منحنی شکست  
۷۰
- شکل ۴-۱۱: اثر تغییر ضریب پراکندگی (بر حسب  $cm^2/s$ ) بر روی جبهه غلظت (الف) ۰/۰۵ (ب) ۰/۱ (پ) ۰/۲۵ (ت) ۰/۴  
۷۱
- شکل ۴-۱۲: تاثیر تغییر فشار بر میزان غیر خطی بودن ایزوترم  
۷۲
- شکل ۴-۱۳: شبیه سازی منحنی شکست برای ایزوترم لانگمیر (منحنی قرمز رنگ) و ایزوترم خطی (منحنی آبی رنگ) در فشار  
۷۴
- ۱/۵ اتمسفر
- شکل ۴-۱۴: شبیه سازی منحنی شکست برای ایزوترم لانگمیر (منحنی قرمز رنگ) و ایزوترم خطی (منحنی آبی رنگ) در فشار  
۷۴
- ۰/۱ اتمسفر

شکل ۴-۱۵: جبهه غلظت برای ایزوترم لانگمیر (منحنی قرمز رنگ) و ایزوترم خطی (منحنی آبی رنگ) در دو فشار (الف)

۷۵

۱/۵ اتمسفر (ب) ۰/۱ اتمسفر

شکل ۴-۱۶: منحنی شکست شبیه سازی شده برای جذب  $CO_2$  (منحنی آبی رنگ) و  $CH_4$  (منحنی قرمز رنگ)

۷۸

شکل ۴-۱۷: ایزوترم جذب  $CO_2$  (منحنی آبی رنگ) و  $CH_4$  (منحنی قرمز رنگ)

۷۹

شکل ۴-۱۸: ایزوترم جذب  $CO_2$  بر روی کربن فعال در دماهای مختلف

شکل ۴-۱۹: ایزوترم جذب برای دماهای: ۳۰۳ کلوین (منحنی سبز رنگ)، ۳۲۲ کلوین (منحنی قرمز رنگ)، ۳۴۱ کلوین

۸۰

(منحنی آبی رنگ)

۸۱

شکل ۴-۲۰: جبهه غلظت برای دماهای (الف) ۳۴۱ کلوین (ب) ۳۲۲ کلوین (پ) ۳۰۳ کلوین

- ۵ جدول ۱-۱: مقایسه ویژگی های جذب شیمیایی و جذب فیزیکی
- ۵۶ جدول ۴-۱: ویژگی های فیزیکی CMS
- ۵۹ جدول ۴-۲: پارامترهای مورد استفاده در شبیه سازی
- ۶۳ جدول ۴-۳: طول ناحیه انتقال جرم برای بسترهای مختلف
- ۶۴ جدول ۴-۴: اثر تغییر غلظت ورودی بر روی طول ناحیه انتقال جرم
- ۶۶ جدول ۴-۵: اثر تغییر ضریب تخلخل بر طول ناحیه انتقال جرم
- ۶۹ جدول ۴-۶: اثر تغییر آهنگ شارش بر طول ناحیه انتقال جرم
- ۷۱ جدول ۴-۷: تاثیر ضریب پراکندگی محوری بر روی طول ناحیه انتقال جرم
- ۷۳ جدول ۴-۸: طول ناحیه انتقال جرم برای دو ایزوترم مختلف در فشار ۱/۵ اتمسفر
- ۷۵ جدول ۴-۹: طول ناحیه انتقال جرم برای دو ایزوترم مختلف در فشار ۰/۱ اتمسفر
- ۷۶ جدول ۴-۱۰: ویژگی های فیزیکی کربن فعال مورد استفاده
- ۷۶ جدول ۴-۱۱: پارامترهای مورد استفاده در شبیه سازی جذب بر روی کربن فعال
- ۷۹ جدول ۴-۱۲: طول ناحیه انتقال جرم برای گازهای  $CH_4$  و  $CO_2$
- ۸۰ جدول ۴-۱۳: اثر تغییر دما بر روی طول ناحیه انتقال جرم

شبیه سازی جذب دینامیکی گاز روی جاذب های با بستر ثابت کربنی

مهدي برزویی

توانایی جامدهای متخلخل برای جذب سطحی، ویژگی می باشد که کاربردهای فراوانی در فرآیندهای جداسازی و تصفیه دارد. کربن های فعال فرآوردهای کربنی می باشند که به دلیل مساحت سطح بالا توانایی جذب مواد مختلف از جریان های گازی و مایع را دارا می باشند. هدف از این تحقیق شبیه سازی جذب دینامیک گاز بر روی بسترهای کربنی و ارزیابی اثر پارامترهای مهم مختلف بر روی منحنی شکست می باشد. برای شبیه سازی منحنی شکست تحت شرایط عملیاتی مختلف یک مدل ریاضی که رفتار دینامیکی فرآیند جذب را توصیف می کند توسعه میابد. در این تحقیق نرم افزار کامسول برای شبیه سازی منحنی شکست مورد استفاده قرار می گیرد.

## Abstract

Simulation of dynamic adsorption of gas on carbon fixed beds

Mehdi Borzouei

The adsorption ability of porous solids is a property that has many applications in separation and purification processes. Activated carbons are processed carbon material that are capable of adsorbing various substances from gas and liquid streams because of their large internal specific surface areas. The purpose of this work is to simulate the dynamic adsorption of gases on carbon beds and to assess the influence of the various important parameters on the breakthrough curve. A mathematical model that describing the dynamic behavior of the adsorption process are developing to simulate the breakthrough curves in different operating conditions. COMSOL Multiphysics software are used to simulate the breakthrough curve in this study.

Keywords: dynamic adsorption, carbon fixed bed, breakthrough curve, LDF model,

در این تحقیق به بررسی و شبیه سازی فرآیند جذب دینامیک گاز بر روی بسترهای ثابت کربنی پرداخته می شود. منحنی شکست بستر شبیه سازی شده و تاثیر عوامل مختلف بر روی آن مورد بررسی قرار می گیرد.

پدیده جذب سطحی از مدت ها پیش مفهومی آشنا برای بشر می باشد. به طور گسترده ای در فرآیندهای جداسازی و تصفیه مورد استفاده قرار می گیرد. قلب فرآیند جذب یک محیط جامد متخلخل می باشد. دلیل استفاده از جامد متخلخل فراهم آوردن مساحت سطح بالا جهت افزایش ظرفیت جذب جاذب می باشد. اما یک محیط متخلخل معمولاً از تعداد بسیار زیادی منافذ بسیار ریز تشکیل شده است. ملکول ها باید به نحوی راه خود را به درون سطح داخلی جاذب پیدا کنند. این امر باعث بوجود آمدن یک مقاومت نفوذی در برابر جریان ملکولی می شود. بررسی ظرفیت جذب جاذب در محدوده تعادل جذب قرار می گیرد و تجزیه و تحلیل مقاومت نفوذی در محدوده سینتیک جذب می باشد. بنابراین برای داشتن درک صحیحی از فرآیند جذب، باید جذب را از دو دیدگاه تعادلی و سینتیکی مورد بررسی قرار دهیم.

در فصل اول به بررسی تعادل جذب می پردازیم. توضیح مختصری در مورد انواع جذب و نیروها و انرژی های دخیل در یک فرآیند جذب (سطحی) داده می شود. سپس انواع مختلف ایزوترم ها را مورد بررسی قرار می دهیم و چند مدل ریاضی پرکاربرد برای توصیف ایزوترم جذب مورد بررسی قرار می گیرد. ایزوترم لانگمیر که دارای مبنای تئوری می باشد توصیف می شود. ایزوترم فروندلیچ یکی دیگر از ایزوترم های پرکاربرد می باشد که مبنایی تجربی دارد. ایزوترم BET برای توصیف جذب چند لایه مناسب می باشد و همچنین برای محاسبه مساحت سطح جاذب از این ایزوترم استفاده می شود.

در فصل دوم به بررسی سینتیک جذب می پردازیم. در ابتدا مراحل مختلف جذب گاز بر روی یک جامد متخلخل و نیز مکانیزم انتقال جرم در آن مورد بررسی قرار می گیرد. مدهای مختلف انتقال جرم درون محیط متخلخل توصیف می شود. ساده ترین مکانیزم انتقال، جریان نودسن می باشد. نفوذ ملکولی، نفوذ سطحی و جریان پوازوی دیگر مدهای انتقال ملکول ها درون منافذ می باشند. در انتهای فصل توضیح مختصری در مورد مکانیزم انتقال جرم خارجی برای یک ذره کروی داده می شود.

در فصل سوم فرآیند جذب گاز بر روی جاذب های بایستر ثابت مورد بررسی قرار می گیرد. جاذب های بایستر ثابت یکی از تجهیزات مورد استفاده در فرآیند جداسازی می باشند. فرآیند جذب بر روی جاذب های بایستر ثابت با انتقال جرم و انتقال حرارت همراه می باشد. در این تحقیق با فرض اینکه عملیات در شرایط هم دما انجام می گیرد از انتقال حرارت صرف نظر می کنیم. در این فصل همچنین منحنی شکست بستر مورد بررسی قرار می گیرد. شبیه سازی منحنی شکست بستر مستلزم حل یکسری معادلات دیفرانسیل به مشتقات جزئی می باشد که در این فصل توضیحاتی در مورد مدل های ریاضی جهت شبیه سازی منحنی شکست داده می شود. همچنین تاثیر شکل ایزوترم بر روی منحنی شکست مورد بررسی قرار می گیرد.

در فصل چهارم ابتدا به بررسی تقریب LDF می پردازیم. تقریب LDF که در این تحقیق مورد استفاده قرار می گیرد یکی از مدل های ریاضی پرکاربرد جهت شبیه سازی جذب بر روی جاذب های بایستر ثابت می باشد. حل معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی با استفاده از نرم افزار کامسول انجام می شود. در ادامه جذب دینامیک گاز  $CO_2$  بر روی بستری از جنس CMS شبیه سازی شده و تاثیر عوامل مختلفی مانند طول بستر، غلظت ورودی به بستر، ضریب تخلخل بستر، آهنگ شارش گاز، پراکندگی محوری و میزان غیر خطی بودن ایزوترم بر روی منحنی شکست بستر، جبهه غلظت و طول ناحیه انتقال جرم مورد بررسی قرار می گیرد. در پایان جذب دینامیک دو گاز  $CO_2$  و  $CH_4$  بر روی کربن فعال شبیه سازی شده و تاثیر نوع گاز و دما را بر روی منحنی شکست مورد بررسی قرار می دهیم.

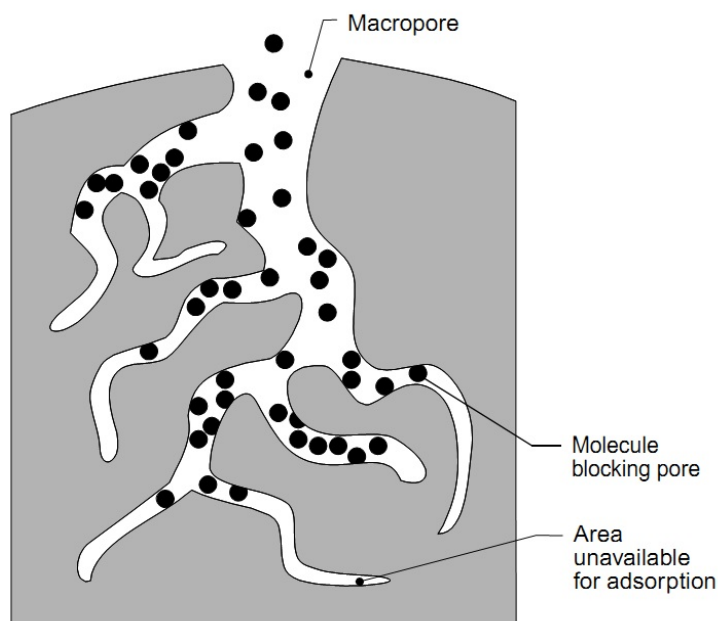
# فصل اول

جذب سطحی



## ۱-۱- مقدمه

فرآیندی که در آن مولکول های گازها یا مایعات به سطح یک جامد می چسبند را «جذب سطحی»<sup>۱</sup> می نامند. این پدیده نخستین بار در ۱۷۷۷ توسط فونتانا<sup>۲</sup> و شیل<sup>۳</sup> با انجام آزمایشاتی مورد بررسی قرار گرفت و کایزر<sup>۴</sup> در ۱۸۸۱ عبارت جذب سطحی را برای توصیف این پدیده به کار برد. در مقابل جذب سطحی فرآیند دیگری به نام جذب توده ای<sup>۵</sup> وجود دارد که هنگامی اتفاق می افتد که مولکول های گازها یا مایعات در یک مایع یا جامد دیگر حل می شوند. یا به عبارتی مولکول ها در حجم جامد جذب می گردند [۱]. در یک فرآیند جذب سطحی مولکول ها، اتم ها یا یون های یک گاز یا مایع به سطح جاذب نفوذ کرده و در آنجا به دلیل وجود نیروهای جاذبه ی ضعیف بین مولکولی نگه داشته می شوند (شکل ۱-۱).



شکل ۱-۱: فرآیند جذب سطحی در یک جامد [۶۵]

کاربرد های جذب سطحی در صنعت به دو دسته تقسیم می شود:

جداسازی: که در آن یک مخلوط گازی چند جزئی به اجزاء تشکیل دهنده خود تجزیه می گردد.

<sup>1</sup> Adsorption

<sup>2</sup> Fontana

<sup>3</sup> Scheele

<sup>4</sup> Kayser

<sup>5</sup> Absorption

خالص سازی (تصفیه): در این فرآیند مقدار کمی ناخالص موجود در یک گاز یا مایع از آن جدا می شود.

## ۱-۲- انواع جذب سطحی

جذب سطحی از نظر نوع نیروهایی که عامل پیوند مولکول های گاز به سطح جاذب اند به دو دسته تقسیم می شود: جذب فیزیکی<sup>۱</sup> و جذب شیمیایی<sup>۲</sup> در جذب فیزیکی نیروهای عامل پیوند نیروهای ضعیف بین مولکولی می باشند. اما جذب شیمیایی ناشی از تشکیل پیوندهای شیمیایی قوی بین مولکول ها و سطح جاذب می باشد.

خصوصیات کلی که جذب فیزیکی را از جذب شیمیایی متمایز می کند در جدول (۱-۱) نشان داده شده است [۲]

جدول ۱-۱: مقایسه ویژگی های جذب شیمیایی و جذب فیزیکی

جذب شیمیایی	جذب فیزیکی
گرمای جذب بالا است .	گرمای جذب پایین است .
جذب به صورت تک لایه است	جذب می تواند به صورت چندلایه نیز اتفاق بیافتد
برگشت ناپذیر است	برگشت پذیر است
به انرژی فعالسازی نیاز دارد .	معمولاً به انرژی فعالسازی نیاز ندارد
سرعت جذب پایین است.	سرعت جذب بالا است .

جذب سطحی فرآیندی گرمازا می باشد که با توجه به رابطه ترمودینامیکی زیر می توان این موضوع را تشریح کرد:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (1-1)$$

<sup>1</sup> Physisorption  
<sup>2</sup> chemisorption

جذب سطحی فرآیندی خود به خودی است بنابراین تغییر در انرژی آزاد گیبس منفی است ( $\Delta G < 0$ ). از طرفی از آنجا که جذب مولکول های گاز باعث کاهش تعداد درجات آزادی آنها می شوند لذا آنتروپی نیز کاهش می یابد ( $\Delta S < 0$ ). بنابراین جهت منفی ماندن  $\Delta G$  باید  $\Delta H$  نیز منفی باشد که این به معنی گرمازا بودن جذب سطحی است.

### ۱-۳- نیروها و انرژی های دخیل در جذب فیزیکی

نیروهای دخیل در جذب فیزیکی شامل نیروهای واندوالس (دافعه - پراکندگی) و نیروهای ناشی از برهمکنش های الکتروستاتیکی می باشند. انرژی پتانسیل بر همکنشی جاذب - مجذوب به صورت زیر می باشد [۳]:

$$\Phi = \Phi_D + \Phi_R + \Phi_{Ind} + \Phi_{E\mu} + \Phi_{EQ} \quad (2-1)$$

در اینجا  $\Phi_D$  انرژی پراکندگی،  $\Phi_R$  انرژی کوتاه برد دافعه،  $\Phi_{Ind}$  انرژی القایی (برهمکنش بین میدان  $E$  و دو قطبی القایی)،  $\Phi_{E\mu}$  انرژی برهمکنش بین میدان  $E$  و دو قطبی دائمی و  $\Phi_{EQ}$  برهمکنش بین گرادیان میدان  $E$  و گشتاور چهار قطبی می باشد. دو جمله اول رابطه (۲-۱) یعنی  $\Phi_R + \Phi_D$ ، از نوع برهمکنش های غیر ویژه می باشند و در هر سیستم جاذب - مجذوبی وجود دارند. اما سه جمله آخری ناشی از بار الکتریکی روی سطح جاذب اند و فقط برای جاذب هایی که دارای ساختار یونی می باشند مانند زئولیت، اکسید فلزات و جامدات یونی وجود دارند.

انرژی پراکندگی:

$$\Phi_D = -\frac{A}{r^6} \quad (3-1)$$

انرژی دافعه کوتاه بود:

$$\Phi_R = \frac{B}{r^{12}} \quad (4-1)$$

انرژی القایی ناشی از دو قطبی نقطه ای القایی در میدان  $E$ :

$$\Phi_{Ind} = -\frac{1}{2}\alpha E^2 = -\frac{\alpha q^2}{2r^4(4\pi\epsilon_0)^2} \quad (5-1)$$

انرژی ناشی از برهمکنش میدان  $E$  با دو قطبی نقطه ای دائمی:

$$\phi_{E\mu} = -E\mu \cos \theta = -\frac{q\mu \cos \theta}{r^2 4\pi\epsilon_0} \quad (6-1)$$

و انرژی ناشی از برهمکنش گرادیان میدان با گشتاور چهارقطبی:

$$\phi_{EQ} = \frac{1}{2} Q\dot{E} = \frac{Qq(3 \cos^2 \theta - 1)}{4r^3 (4\pi\epsilon_0)} \quad (7-1)$$

در روابط فوق  $A$  و  $B$  مقادیری ثابت اند.  $\alpha$  قطبش پذیری،  $E$  میدان الکتریکی،  $q$  بار الکتریکی یون روی سطح جاذب،  $\mu$  گشتاور دو قطبی دائمی،  $\theta$  زاویه بین جهت میدان یا جهت گرادیان میدان و محور دو قطبی یا چهارقطبی خطی،  $Q$  گشتاور چهارقطبی خطی و  $r$  فاصله بین دو جزء برهمکنشی است.

انرژی پراکندگی و انرژی دامنه کوتاه برد به شکل یک پتانسیل «لنارد - جونز<sup>۱</sup>» برهمکنش می کنند:

$$\phi = \frac{B}{r^{12}} - \frac{A}{r^6} \quad (8-1)$$

برای یک فاصله تعادلی  $r_0$ ،  $\phi = \phi_D + \phi_R$  به کمترین مقدار خود می رسد با داشتن مقدار  $A$  می توان ثابت  $B$  را به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\frac{d\phi}{dr} = 0 ; r = r_0 \quad (9-1)$$

$$\frac{-12B}{r_0^{13}} + \frac{6A}{r_0^7} = 0 \quad (10-1)$$

$$B = \frac{Ar_0^6}{2} \quad (11-1)$$

اما برای محاسبه ثابت  $A$  معمولاً معادله کرک وود-مولر<sup>۲</sup> به کار برده می شود

$$A = 6mc^2 \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\left(\frac{\alpha_1}{\chi_1}\right) + \left(\frac{\alpha_2}{\chi_2}\right)} \quad (12-1)$$

$c$  سرعت نور،  $m$  جرم الکترون،  $\chi$  پذیر رفتاری مغناطیسی و  $\alpha_1$ ،  $\alpha_2$  قطبش پذیری مولکول های ۱ و ۲ می باشند.

<sup>1</sup> Lennard - Jones potential

<sup>2</sup> Kirkwood - Muller equation