f.V90

۱۳۸۱ /۴/ ۲۶

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
تحویل مدارک

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده شیمی

تعمیم معادلهٔ حالت LIR برای ترکیبات آلی با زنجیر طولانی

پایان نامهٔ کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

زهرا کلانتر

۴۰۷۹۰

استاد راهنما:

دکتر غلامعباس پارسافر

شهریور ۱۳۸۰

دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک خانم زهرا کلانتر

تحت عنوان

تعمیم معادلهٔ حالت LIR برای ترکیبات آلی با زنجیر طولانی

در تاریخ ۸۰/٦/۷ توسط کمیتهٔ تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب قرار گرفت.

۱- استاد راهنمای رساله(رئیس هیئت داوران)	دکتر غلامعباس پارسافر
۲- استاد مشاور، دانشکدهٔ شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان	دکتر بیژن نجفی
۳- استاد داور، دانشکدهٔ شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان	دکتر محمود تبریزچی
٤- استاد داور، دانشکدهٔ علوم دانشگاه شیراز	دکتر محمد هادی قطعی
٥- سرپرست تحصیلات تکمیلی دانشکده	دکتر تقی خیامیان

تشکر و قدردانی

معشوق مطلقی را حمد و ستایش سزاست جل جلاله که تمـــام موجودات عاشق مقید اویند. همه راه اوست می پویند و وصـــل اوست می جویند و حمد اوست می گویند.
هر برگی از دفتر معرفتش آیتی است و هـــر گیـــاهی در بیـــدای وحدتش افراشته رأیتی، با این همه عالمی متفکرانند و جـــهانی به دیدهٔ حیرت نگران که هر چه جهد بیـــش نمـــایند و بیشـــتر گرایند منزل مقصود دورتر شود و دیدهٔ معرفت بی نورتر.

اکنون که به یاری خداوند متعال موفق به اتمام پایان‌نامهٔ خود شده‌ام وظیفهٔ خود میدانم کـــه از زحمات همهٔ عزیزانی که مرا به نوعی در انجام این کار یاری نموده‌انـــد تشکر نمـــایم. در ابتدا از استاد گرامی جناب آقـــای دکـــتر غلامعبـــاس پارســـافر بخـــاطر راهنماییـــهای بیدریـــغ و حمایتهای همه جانبهٔ ایشان سپاسگذاری نموده، برای ایشان ســـلامتی و موفقیـــت روز افـــزون آرزو می‌نمایم. از جنـــاب آقـــای دکـــتر بیـــژن نجفـــی کـــه از مشـــاوره‌ها و مســـاعدتهای ایشـــان استفاده نموده‌ام، تشکر می کنم.از اساتید بزرگوار، آقایان دکتر محمد هادی قطعـــی و دکـــتر محمود تبریزچی بخاطر مطالعهٔ پایان‌نامه و ارائـــهٔ نقطـــه نظـــرات ســـودمند قدردانـــی می‌نمـــایم. همچنین از زحمات اساتید گرانقدر و پرسنل زحمتکش دانشکدهٔ شیمی تشکر می کنم.

کلیهٔ حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و نوآوریهای ناشی
از تحقیق موضوع این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان است.

تقدیم به همسر و فرزندانم مینا و علیرضا

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
تحویل بورس

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست مطالب ..... هشت

فهرست اشکال ..... یازده

فهرست جداول ..... دوازده

فهرست نمادها ..... شانزده

چکیده ۱

فصل اول : نیروهای بین‌مولکولی و معادلهٔ حالت

۱-۱ حالت گازی ۱

۱-۲ حالت مایع ۲

۱-۳ حالت جامد ۳

۱-٤ نیروهای بین مولکولی ۳

۱-٤-۱ تاریخچه ٤

۱-٤-۲ انرژی پتانسیل بین مولکولی ٥

۱-٤-۳ انرژی پیکربندی و جمع‌ناپذیری آن ٥

۱-٤-٤ منشأ نیروهای بین مولکولی ٦

۱-٤-٤ (الف) سهم الکترواستاتیکی ۷

۱-٤-٤ (ب) سهم القایی ۷

۱-٤-٤ (ج) سهم پراکندگی ۷

۱-٤-٥ محاسبهٔ انرژی الکترواستاتیکی برد بلند ۸

۱-٤-٥(الف) انرژی الکترواستاتیک ۸

۱-٤-٥(ب) انرژی القایی ۹

۱-٤-٥(ج) انرژی پراکندگی ۹

۱-٤-٦ انرژی برهم‌کنش برد کوتاه ۱۰

۱-٥ نیروهای بین مولکولی و معادلهٔ حالت ۱۱

۱-٥-۱ معادلات حالت مربوط به سیالات رقیق ۱۱

۱-٥-۱(الف) معادلهٔ دو پارامتری وان دروالس ۱۱

۱-٥-۱(ب) معادلهٔ پینگ- رابینسون ۱۲

۱-٥-۱(ج) معادلهٔ ردلیچ- وانگ ۱۳

۱-٥-۱(د) معادله بتی- بریجمن ۱۳

۱-٥-۱(هـ) معادلهٔ حالت ویریال ۱٤

۱-٥-۱(و) قاعدهٔ همدماهای خطی توسعه‌یافته ۱٥

۱-۵-۲ معادلات حالت مربوط به سیالات چگال ۱۶
۱-۵-۲(الف) معادلهٔ تیت ۱۶
۱-۵-۲(ب) معادلهٔ مارناگان ۱۷
۱-۵-۲(ج) معادلهٔ حالت ایم- سانگ- میسون ۱۷
۱-۵-۲(د) قاعدهٔ هوانگ- اکانل ۱۸
۱-۵-۲(هـ) معادلهٔ حالت عمومی برای سیال چگال ۱۹
۱-۵-۲(و) قاعدهٔ همدمای خطی (LIR) ۱۹

فصل دوم: روش سهم گروه و معادلهٔ حالت

۲-۱ پیش‌بینی پارامترهای بحرانی ۲۶
۲-۱-۱ روش لیدرسن ۲۷
۲-۱-۲ روش کنستانتینو و گانی ۲۷
۲-۲ پیش‌بینی فاکتور شکل ۳۰
۲-۲-۱ تعیین فاکتور شکل براساس سایر خواص اولیهٔ دیگر ۳۰
۲-۲-۱(الف) روش ادمیستر ۳۰
۲-۲-۱(ب) روش لی- کسلر ۳۰
۲-۲-۱(ج) روش لین- چائو ۳۱
۲-۲-۲ تعیین فاکتور شکل بر اساس روش سهم گروهها ۳۱
۲-۳ پیش‌بینی نقطهٔ جوش نرمال ۳۱
۲-۳-۱ روش جوباک ۳۲
۲-۳-۲ به کارگیری روش سهم گروه غیرخطی برای پیش‌بینی نقطهٔ جوش نرمال ۳۲
۲-٤ پیش‌بینی هدایت گرمایی ۳۳
۲-۵ پیش‌بینی حدود اشتعال‌پذیری ۳٤
۲-۵-۱ روش نوزدا برای حد بالاتر اشتعال‌پذیری ۳۵
۲-۵-۲ روش شبکو ۳۵
۲-۵-۳ روش های- دنر برای حد بالاتر اشتعال‌پذیری ۳۵
۲-٦ پیش‌بینی دانسیتهٔ مایعات خالص ۳٦
۲-٦-۱ پیش‌بینی دانسیته مواد منفجره ۳٦
۲-٦-۲ پیش‌بینی دانسیته هیدروکربنهای مایع اشباع ۳۷
۲-٦-۳ پیش‌بینی دانسیتهٔ انواع مایعات آلی ۳۸
۲-٦-٤ پیش‌بینی دانسیتهٔ پلیمرها برحسب دما ۳۹
۲-۷ خواص ترمودینامیکی استاندارد در یک گسترهٔ دمایی وسیع ۳۹
۲-۸ پیش‌بینی فشار بخار مایعات ٤۰
۲-۹ کاربردهای دیگر ٤۱

۲-۱۰ استفاده از روش سهم گروهها در معادلهٔ حالت ٤١
۲-۱۰-۱ معادلهٔ حالت مبتنی بر سهم گروه اسکجولد- یورگنسن ٤١
۲-۱۰-۲ معادلهٔ حالت مبتنی بر سهم گروه پاتل و تجا ٤٤
۲-۱۰-۳ سهم زنجیره‌های چرخنده در معادله حالت ٤٥

فصل سوم: استفاده از روش سهم گروهها در تعیین پارامترهای معادلهٔ حالت LIR
۳-۱ انحراف از رفتار خطی LIR برای سیالات آلی خطی با زنجیر بلند ٤٨
۳-۲ استخراج معادلهٔ حالت جدید ٤٩
۳-۳ پیش‌بینی پارامترهای A_m و B_m آلکانها با استفاده از روش سهم گروهها ٥٠
۳-۳-۱ تعیین سهم گروههای کربنی در پارامترهای A_m و B_m ٥١
۳-۳-۲ تعیین سهم گروههای کربنی در دماهای دیگر ٥٤
۳-٤ محدودهٔ دمایی معادلهٔ حالت ارائه شده ٥٤
۳-٥ تعمیم روابط فوق به مخلوط آلکانها ٥٥
۲-٦ تعمیم روش سهم گروهها به الکلها ٥٧

فصل چهارم: بحث و نتیجه‌گیری ٩٧
مراجع ١٠٢

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۱: نمودارهای الف)B_m و ب) A_m بر حسب $1/T$ برای پروپان ٦٠
شکل ۳-۲: نمودارهای الف)B_m و ب) A_m بر حسب $1/T$ برای n-بوتان..... ٦١
شکل ۳-۳: رفتار خطی معادلهٔ ۳-۱ برای مخلوط (n-C_6)۰/۸+(n-C_{16})۰/۲ در دمای ۲۹۸/۱۵ K..... ٦٢
شکل ۳-٤: رفتار خطی معادلهٔ ۳-۱ برای مخلوط (n-C_6)۰/۸+(n-C_{16})۰/۲ در دمای ۳٤۸/۱۵ K..... ٦٢

فهرست جداول

جدول ۳-۱: رفتار خطی تابع $(Z-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای متان[۹۰] دردماهای معین و محدوده‌های فشار داده شده ۶۳

جدول ۳-۲: شروع انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای اتان[۹۰] دردماهای معین و محدوده‌های فشار داده شده ۶۳

جدول ۳-۳: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای پروپان[۹۰] ۶۳

جدول ۳-٤: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-بوتان[۹۰]..... ٦٤

جدول ۳-٥: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-پنتان[۹۱] ٦٤

جدول ۳-٦: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-هگزان[۹۲]..... ٦٤

جدول ۳-۷: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-هپتان[۹۳]..... ٦٥

جدول ۳-۸: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n -اکتان[۹٤]..... ٦٥

جدول ۳-۹: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-نونان[۹٥] ٦٥

جدول ۳-۱۰: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-دکان[۹۱]..... ٦٦

جدول ۳-۱۱: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-آن‌دکان[۹٦] ٦٦

جدول ۳-۱۲: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-دودکان[۹٤]..... ٦٦

جدول ۳-۱۳: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-تری‌دکان[۹٦]..... ٦٧

جدول ۳-۱٤: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-پنتادکان[۹۷] ٦٧

جدول ۳-۱٥: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-هگزادکان[۹۲] ٦٧

جدول ۳-۱٦: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-هپتادکان[۹٦]..... ٦٨

جدول ۳-۱۷: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-اکتادکان[۹۸]..... ٦٨

جدول ۳-۱۸: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-نونادکان[۹۸] ٦٨

جدول ۳-۱۹: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای n-ایکوزان[۹٦]..... ٦٩

جدول ۳-۲۰: انحراف از رفتار خطی معادلهٔ حالت LIR برای سیکلوهگزان[۹۹] ٦٩

جدول ۳-۲۱: بررسی رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای اتان[۹۰] ۷۰

جدول ۳-۲۲: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای پروپان[۹۰] ۷۰

جدول ۳-۲۳: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-بوتان[۹۰]..... ۷۰

جدول ۳-۲٤: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-پنتان[۹۱]..... ۷۱

جدول ۳-۲٥: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-هگزان[۹۲] ۷۱

جدول ۳-۲٦: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-هپتان[۹۳]..... ۷۱

جدول ۳-۲۷: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n -اکتان[۹٤]..... ۷۲

جدول ۳-۲۸: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-نونان[۹٥] ۷۲

جدول ۳-۲۹: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-دکان[۹۱]..... ۷۲

جدول ۳-۳۰: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-آن‌دکان[۹٦] ۷۳

جدول ۳-۳۱: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-دودکان[۹٤]..... ۷۳

جدول ۳-۳۲: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-تری‌دکان[۹٦]..... ۷۳

جدول ۳-۳۳: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-پنتادکان[۹۷] ۷٤
جدول ۳-۳٤: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-هگزادکان[۹۲] ۷٤
جدول ۳-۳۵: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-هپتادکان[۹٦] ۷٤
جدول ۳-۳٦: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-اکتادکان[۹۸] ۷۵
جدول ۳-۳۷: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-نونادکان[۹۸] ۷۵
جدول ۳-۳۸: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای n-ایکوزان[۹٦] ۷۵
جدول ۳-۳۹: مقادیر $\frac{a_1}{R}$، a_2، $\frac{b_1}{R}$ و b_2 برحسب n(تعداد گروه کربنی) برای آلکانهای خطی و سیکلوهگزان ۷٦
جدول ۳-٤۰: مقدار پارامترهای A_m و B_m برای سه ترکیب پایه در دمای ۳۰۰K ۵۳
جدول ۳-٤۱: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها، با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-پنتان [۹۱] در دمای ۳۰۰K ۷۷
جدول ۳-٤۲: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها، با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-هگزان [۹۲] در دمای ۳۰۰K ۷۸
جدول ۳-٤۳: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها، با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-اکتان [۹٤] در دمای ۳۰۰K ۷۸
جدول ۳-٤٤: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها، با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برایn-هپتان [۹۳] در دمای ۳۰۰K ۷۹
جدول ۳-٤۵: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها، با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-نونان [۹۵] در دمای ۳۰۰K ۸۰
جدول ۳-٤٦: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-دکان [۹۱] در دمای ۳۰۰K ۸۱
جدول ۳-٤۷: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-آن‌دکان [۹٦] در دمای ۳۰۰K ۸۲
جدول ۳-٤۸: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-دودکان [۹٤] در دمای ۳۰۰K ۸۲
جدول ۳-٤۹: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-تری‌دکان [۹٦] در دمای ۳۰۰K ۸۳
جدول ۳-۵۰: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها، با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-هگزان [۹۲] در دمای ۳٤۸K ۸٤
جدول ۳-۵۱: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها، با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-اکتان [۹٤] در دمای ۳٤۸K ۸٤
جدول ۳-۵۲: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها، با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-هپتان [۹۳] در دمای ۳٤۸K ۸۵

جدول ۳-۵۳: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-دکان[۹۱] در دمای ۳٤۸K ۸٦

جدول ۳-٥٤: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای n-دودکان [۹٤] در دمای ۳٤۸K ۸۷

جدول ۳-٥٥: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای مخلوط x n-$C_{۱٦}H_{۳٤}$ + (۱-x) $C_{٦}H_{۱٤}$ [۹۲]، در دمای ۳۰۰K و x=۰/۲ ..... ۸۸

جدول ۳-٥٦: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای مخلوط x n-$C_{۱٦}H_{۳٤}$ + (۱-x) $C_{٦}H_{۱٤}$ [۹۲]، در دمای ۳۰۰K و x=۰/۸ ..... ۸۸

جدول ۳-۵۷ : مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای مخلوط x n-$C_{۱٦}H_{۳٤}$ + (۱-x) $C_{٦}H_{۱٤}$ [۹۲]، در دمای ۳۲۳K و x=۰/۲ ..... ۸۹

جدول ۳-۵۸: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای مخلوط x n-$C_{۱٦}H_{۳٤}$ + (۱-x) $C_{٦}H_{۱٤}$ [۹۲]، در دمای ۳۲۳K و x=۰/٤ ..... ۸۹

جدول ۳-۵۹: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای مخلوط x n-$C_{۱٦}H_{۳٤}$ + (۱-x) $C_{٦}H_{۱٤}$ [۹۲]، در دمای ۳۲۳K و x=۰/۸ ..... ۹۰

جدول ۳-٦۰: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای مخلوط x n-$C_{۱٦}H_{۳٤}$ + (۱-x) $C_{٦}H_{۱٤}$ [۹۲]، در دمای ۳٤۸K و x=۰/۲ ..... ۹۰

جدول ۳-٦۱: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای مخلوط x n-$C_{۱٦}H_{۳٤}$ + (۱-x) $C_{٦}H_{۱٤}$ [۹۲]، در دمای ۳٤۸K و x=۰/٤ ..... ۹۱

جدول ۳-٦۲: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای مخلوط x n-$C_{۱٦}H_{۳٤}$ + (۱-x) $C_{٦}H_{۱٤}$ [۹۲]، در دمای ۳٤۸K و x=۰/۸ ..... ۹۱

جدول ۳-٦۳: مقادیر سهم گروههای کربنی در دمای ۳۰۰K ٥٦

جدول ۳-٦٤: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای ۱-پنتانول[۱۰۱] ۹۲

جدول ۳-٦٥: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای ۱-هگزانول[۱۰۱] ۹۲

جدول ۳-٦٦: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای ۱-هپتانول[۱۰۱] ۹۲

جدول ۳-٦۷: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای ۱-اکتانول[۱۰۱] ۹۳

جدول ۳-٦۸: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای ۱-نونانول[۱۰۱] ۹۳

جدول ۳-٦۹: رفتار خطی تابع $(Z/n-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای ۱-دودکانول[۱۰۱] ۹۳

جدول ۳-۷۰: مقادیر سهم گروههای کربنی در دمای ۳۲۳/۱٥K : ٥۸

جدول ۳-۷۱: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای ۱-بوتانول [۱۰۰] در دمای ۳۲۳/۱٥K ۹٤

جدول ۳-۷۲: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای ۱-هگزانول [۱۰۱] در دمای ۳۲۳/۱٥K ۹٤

جدول ۳-۷۳: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای ۱-هپتانول [۱۰۱] در دمای ۳۲۳/۱٥K ۹٥

جدول ۳-۷٤: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای ۱-اکتانول [۱۰۱] در دمای ۳۲۳/۱۵K ۹۵
جدول ۳-۷۵: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای ۱-نونانول. [۱۰۱] در دمای ۳۲۳/۱۵K ۹٦
جدول ۳-۷٦: مقایسهٔ دانسیتهٔ محاسبه شده، ρ_{cal}، با استفاده از روش سهم گروهها با دانسیتهٔ تجربی، ρ_{exp}، برای ۱-دودکانول [۱۰۱] در دمای ۳۲۳/۱۵K ۹٦

فهرست علائم

انتالپی	H
انتروپی	S
انرژی القایی	U_{ind}
انرژی الکتروستاتیک	U_{el}
انرژی پراکندگی	U_{dis}
بار مولکول	Q
پارامترهای معادلهٔ حالت LIR	$A,\ B$
پارامترهای معادلهٔ حالت وان‌دروالس	$a,\ b$
پتانسیل برهم‌کنش جفت	φ
پتانسیل پیکربندی سیستم	U_N
تراکم‌پذیری همدما	κ_T
تعداد مولکولها	N
ثابت بولتزمن	k
ثابت گازها	R
جرم مولکول I	m_{I}
حجم	V
حجم بحرانی	V_{c}
دانسیتهٔ بحرانی	ρ_{c}
دانسیتهٔ بویل	ρ_{b}
دمای بحرانی	T_{c}
دمای بویل	T_{B}
دمای کاهش‌یافته	T_{r}
دمای کلوین	T
ضریب تراکم‌پذیری	Z
ضریب تراکم‌پذیری بحرانی	Z_{c}
ضریب چهارم ویریال	$D(T)$
ضریب دوم ویریال	$B(T)$
ضریب سوم ویریال	$C(T)$
ضریب کشیدگی	B
عدد آووگادرو	N_{A}
عدد کوردیناسیون	$z(\rho)$
عمق چاه پتانسیل	ε
فاصلهٔ بین مولکولی	r

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران