بسم الله الرحمن الرحيم

بسمه تعالی

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

آقای نادر رضائی پایان نامه ۹ واحدی خود را با عنوان **تعیین توزیع اندازه حفرات کربن فعال با استفاده از روشهای نظریه تابعی چگالی ، دوبینن استوکلی و هرواث کاوازو** در تاریخ ۱۳۹۰/۴/۱۴ ارائه کردند.

اعضای هیات داوران نسخه نهایی این پایان نامه را از نظر فرم و محتوا تایید کرده، پذیرش آنرا برای اخذ درجه کارشناسی ارشد مهندسی شیمی پیشنهاد می کنند.

عضو هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضا
استاد راهنما	دکتر رامین کریم زاده	دانشیار	
استاد ناظر	دکتر محمدرضا امیدخواه نسرین	دانشیار	
استاد ناظر	دکتر حسن پهلوانزاده	استاد	
استاد ناظر	دکتر شهره فاطمی	استاد	
مدیر گروه (یا نماینده گروه تخصصی)	دکتر حسن پهلوانزاده	استاد	

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش‌های علمی
دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسان‌ها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهش‌های علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرح‌های تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می‌باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تأیید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجوی مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می‌باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب و یا نرم‌افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده‌ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده‌ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین‌نامه‌های مصوب انجام شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این آیین‌نامه در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ ۸۷/۴/۱ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۸۷/۴/۲۳ در هیأت رئیسه دانشگاه به تأیید رسید و در جلسه مورخ ۸۷/۷/۱۵ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

آئین‌نامه پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان‌نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیت‌های علمی پژوهشی دانشگاه است. بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش‌آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان‌نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به‌طور کتبی به دفتر "دفتر نشر آثار علمی"دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه)، عبارت ذیل را چاپ کند:

" کتاب حاضر، حاصل **پایان‌نامه کارشناسی ارشد** نگارنده **نادر رضائی** در رشته **مهندسی شیمی** است که در سال **۱۳۹۰** در دانشکده **مهندسی شیمی** دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی **دکتر رامین کریم‌زاده**، از آن دفاع شده است.

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به "دفتر نشر آثار علمی" دانشگاه اهداء کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به‌عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می‌کند در صورت خودداری از پرداخت‌های بهای خسارت، دانشگاه مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند، به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تأمین نماید.

ماده ۶: اینجانب **نادر رضائی** دانشجوی رشته **مهندسی شیمی** مقطع **کارشناسی ارشد** تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می‌شوم.

نام و نام‌خانوادگی

تاریخ و امضاء

دانشکده مهندسی شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

رشته مهندسی شیمی

گرایش ترموسینتیک

تعیین توزیع اندازه حفرات کربن فعال با استفاده از روش‌های نظریه تابعی چگالی، دوبینن استوکلی و هرواث کاوازو

نگارنده:

نادر رضائی

استاد راهنما:

دکتر رامین کریم زاده

تیرماه ۱۳۹۰

تقدیم

به پدر و مادر

عزیزم

تقدیر و تشکر

در آغاز لازم می‌دانم از زحمات استاد ارجمندم جناب آقای دکتر کریم زاده تشکر و قدردانی نمایم. همچنین از سرکار خانم موسوی به خاطر تمامی تلاش‌هایشان جهت انجام این پروژه و راهنمایی‌های ایشان به عنوان مشاور که همواره راهگشای اینجانب در این پروژه بوده است کمال تشکر و قدردانی را دارم. از دوست عزیزم جناب آقای سعید هادی به خاطر راهنمایی‌هایشان در بخش نرم‌افزاری و از جناب آقای سید مهدی جزایری و دوست خوبم آقای میثم حاج حیدری به خاطر مشاوره‌هایشان در نوشتن این پایان نامه کمال تشکر و قدردانی را دارم. در پایان از تمامی عزیزانی که مرا در انجام این پروژه همراهی نمودند تشکر و قدردانی می‌نمایم.

چکیده

مطالعه و توصیف ویژگی‌های اجسام متخلخل به خاطر نقش آنها در فرآیندهای جذب سطحی یکی از مباحث مورد توجه در علوم مهندسی شیمی و شیمی فیزیک می‌باشد. تعیین توزیع اندازه حفرات که به کمک اندازه‌گیری ایزوترم‌های آزمایشگاهی صورت می‌گیرد، یکی از مهمترین مشخصه‌های یک جاذب است که نقش مهمی در شناسایی و پیش‌بینی سینتیک فرآیند جذب سطحی دارد. روش‌های زیادی برای تحلیل ایزوترم‌های جذب موجود است که برخی از آنها قادر به ارائه توزیع اندازه حفرات نیستند و فقط حجم کلی حفرات جاذب را به دست می‌دهند. برخی دیگر از روش‌های موجود نیز تنها برای محدوده خاصی از حفرات مثل محدوده میکرو یا مزو ارائه شده‌اند. در میان روش‌های تحلیل حفرات میکرو، روش‌های دوبینن استوکلی و هرواث کاوازو از پرکاربردترین روش‌های تحلیلی هستند که قادر به ارائه نمودار توزیعی اندازه حفرات می‌باشند. در حال حاضر دقیق‌ترین و جامع‌ترین روش تحلیل اندازه حفرات، روش نظریه تابعی چگالی است که تئوری مولکولی بسیار قوی داشته و فرآیند جذب را در مقیاس مولکولی به تصویر می‌کشد. یکی از دلایل موفقیت این روش این است که محدودیتی از نظر محدوده پیش‌بینی اندازه حفرات ندارد . بر اساس مطالعات صورت گرفته در این تحقیق، استفاده از نظریه تابعی چگالی در تعیین اندازه حفرات و روش حل آن در هیچ یک از منابع و مراجع قابل دسترسی به صورت کاربردی و قابل حل ارائه نشده است، بنابراین در این رساله علاوه بر تعیین توزیع اندازه حفرات به کمک دو روش دوبینن استوکلی و هرواث کاوازو که جزئیات حل آنها به صورت کامل بیان شده است، الگوریتم حل روش نظریه تابعی چگالی نیز به تفصیل ارائه و نمودار توزیعی حفرات جاذب به کمک آن به دست آمده است. در انتها نتایج سه روش فوق برای نمونه‌هایی از کربن فعال محاسبه و با یکدیگر مقایسه شده اند.

کلمات کلیدی: توزیع اندازه حفرات، نظریه تابعی چگالی، دوبینن استوکلی، هرواث کاوازو

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست شکل‌ها ..... ج
فهرست جدول‌ها ..... ه
فهرست علائم ..... و

فصل ۱ پیشگفتار ۱
۱-۱ مقدمه ۲
۱-۲ توصیف تخلخل یک جاذب با استفاده از ایزوترم های جذب ۳
۱-۳ هدف از این مطالعه و فصول پایان‌نامه ۱۰

فصل ۲ مروری بر مطالعات انجام شده ۱۲
۲-۱ مقدمه ۱۳
۲-۱ تحلیل حفرات میکرو ۱۳
۲-۱-۱ معادله BDDT ۱۴
۲-۱-۲ روش DA و DR ۱۸
۲-۱-۳ روش DS ۲۰
۲-۱-۴ روش HK ۲۰
۲-۲ تحلیل حفرات مزو ۲۰
۲-۲-۱ مدل کلوین ۲۱
۲-۲-۲ روش BdB ۲۲
۲-۳ روش‌های جامع ۲۳
۲-۳-۱ روش نظریه تابعی چگالی ۲۳
۲-۴ جمع‌بندی ۲۹

فصل ۳ مدل‌های تعیین اندازه حفرات جاذب (دوبینن استوکلی، هرواث کاوازو و ریه تابعی چگالی) ۳۱
۳-۱ مقدمه ۳۲
۳-۲ روش دوبینن استوکلی ۳۳
۳-۲-۱ تئوری ۳۳
۳-۲-۲ الگوریتم حل ۳۸
۳-۳ روش هرواث کاوازو ۴۱

۳-۳-۱ تئوری ۴۱
۳-۳-۲ الگوریتم حل ۴۶
۳-۴ روش نظریه تابعی چگالی ۴۹
۳-۴-۱ تئوری ۴۹
۳-۴-۲ الگوریتم حل ۵۹
فصل ۴ محاسبه توزیع اندازه حفرات (نتایج و بحث) ۷۶
۴-۱ مقدمه ۷۷
۴-۲ محاسبه تابع توزیعی اندازه حفرات به کمک مدل دوبینن استوکلی ۷۷
۴-۲-۱ داده‌های ایزوترم و پارامترهای مدل ۷۷
۴-۲-۲ تعیین نمودار توزیعی اندازه حفرات جاذب ۷۹
۴-۳ محاسبه تابع توزیعی اندازه حفرات به کمک مدل هرواث کاوازو ۸۱
۴-۳-۱ داده‌های ایزوترم و پارامترهای مدل ۸۱
۴-۳-۲ تعیین نمودار توزیعی اندازه حفرات جاذب ۸۴
۴-۴ محاسبه تابع توزیع اندازه حفرات به کمک نظریه تابعی چگالی ۸۸
۴-۴-۱ داده‌های ایزوترم و پارامترهای مدل ۸۸
۴-۴-۲ تعیین نمودار توزیعی اندازه حفرات جاذب ۸۹
۴-۵ مقایسه نتایج روش‌های دوبینن استوکلی، هرواث کاوازو و نظریه تابعی چگالی ۹۸
۴-۵-۱ داده‌های ایزوترم ۹۸
۴-۵-۲ تعیین توزیع اندازه حفرات ۹۹
فصل ۵ نتیجه‌گیری و پیشنهادات ۱۰۲
۵-۱ نتیجه گیری ۱۰۳
۵-۲ پیشنهادات ۱۰۴
مراجع ۱۰۵

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱ انواع ایزوترم‌های جذب ۵
شکل ۱-۲ ایزوترم جذب نوع I ۵
شکل ۱-۳ ایزوترم جذب نوع II ۶
شکل ۱-۴ ایزوترم جذب نوع III ۷
شکل ۱-۵ ایزوترم جذب نوع IV ۷
شکل ۱-۶ ایزوترم جذب نوع V ۸
شکل ۱-۷ ایزوترم جذب نوع VI ۹
شکل ۲-۱ نمودار تبدیل یافته BET توسط DBBT جهت تعیین مساحت سطحی برای مواد سیلیکونی ۱۴
شکل ۲-۲ نمودار تبدیل یافته BET توسط BDDT جهت تعیین مساحت سطحی برای مواد آلی .. ۱۵
شکل ۲-۳ نمودار رابطه BDDT برای مقادیر مختلف N و با فرض C=20 ..... ۱۸
شکل ۳-۱ فلوچارت محاسبه توزیع اندازه حفرات جاذب با روش دوبینن استوکلی ۴۰
شکل ۳-۲ عرض مؤثر حفره ۴۶
شکل ۳-۳ فلوچارت محاسبه توزیع اندازه حفرات جاذب به کمک روش هرواث کاوازو ۴۸
شکل ۳-۴ شمای فرضی مجموعه کانونیکال ۴۹
شکل ۳-۵ شمای فرضی مجموعه گرند کانونیکال ۵۰
شکل ۳-۶ نمایش یک ذره در حال جذب درون یک حفره ویفری شکل ۶۰
شکل ۳-۷ محور مختصات برای یک حفره ویفری شکل ۶۱
شکل ۳-۸ موقعیت فضایی دو بردار r و 'r در داخل یک حفره ۶۲
شکل ۳-۹ نمایش یک ذره در موقعیت‌های تعرف شده در رابطه (۳-۷۴). ۶۴
شکل ۳-۱۰ نمایش لایه‌ای فرضی در داخل حفره ۶۵
شکل ۳-۱۱ برشی از رویه پتانسیل حاصل از برهم‌کنش نقاط صفحه S با نقطه z ۶۷
شکل ۳-۱۲ نمایش لایه‌های فرضی در داخل حفره ۷۰
شکل ۳-۱۳ فلوچارت محاسبه توزیع اندازه حفرات جاذب به کمک روش نظریه تابعی چگالی ۷۵
شکل ۴-۱ ایزوترم جذب بنزن در دما ۲۹۳ کلوین روی کربن فعال نوع AC12 ..... ۷۸
شکل ۴-۲ توزیع اندازه حفرات کربن نوع AC12 بر اساس داده‌های جدول ۴-۱ ..... ۸۰
شکل ۴-۳ ایزوترم دفع نیتروژن از روی کربن نوع HGM 366 در دمای نیتروژن مایع ۸۱

شکل ۴-۴ نمودار تجمعی توزیع اندازه حفرات با روش هرواث کاوازو ۸۶
شکل ۴-۵ نمودار تفاضلی توزیع اندازه حفرات با روش هرواث کاوازو ۸۷
شکل ۴-۶ ایزوترم جذب نیتروژن روی کربن فعال نوع SD-HD 4000..... ۸۸
شکل ۴-۷ پروفایل‌های چگالی در فشار نسبی ۰/۹۹ برای فعال نوع SD-HD 4000 ..... ۹۰
شکل ۴-۸ توزیع اندازه حفرات جاذب با روش نظریه تابعی چگالی..... ۹۱
شکل ۴-۹ ناحیه حفرات مزو نمایش داده شده در شکل ۴-۸..... ۹۲
شکل ۴-۱۰ فلوچارت محاسبه ایزوترم تئوری ۹۴
شکل ۴-۱۱ مقایسه نمودارهای ایزوترم تئوری و آزمایشگاهی..... ۹۵
شکل ۴-۱۲مقایسه نتایج روش نظریه تابعی چگالی با نرم افزار دی-اف-تی پلاس..... ۹۶
شکل ۴-۱۳ مقایسه ایزوترم تئوری نرم‌افزار ®DFT Plus با ایزوترم آزمایشگاهی..... ۹۷
شکل ۴-۱۴ ایزوترم جذب نیتروژن روی کربن نوع A15 در دمای ۷۷ کلوین ۹۸
شکل ۴-۱۵ توزیع اندازه حفرات کربن نوع A15 به کمک روش‌های DS، HK و DFT..... ۹۹
شکل۴-۱۶ مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج گزارش شده در مقاله..... ۱۰۱

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول ۳-۱ تعریف پارامترهای موجود در رابطه دوبینن رادوشکویچ ۳۴
جدول ۳-۲ پارامترهای معادله دوبینن استوکلی ۳۷
جدول ۳-۳ ضریب شباهت منحنی مشخصه ۳۹
جدول ۳-۴ حجم مولی چند گاز مختلف ۳۹
جدول ۳-۵ عرض مؤثر حفرات ۴۷
جدول ۴-۱ ایزوترم جذب بنزن روی کربن فعال AC12 در دمای ۲۹۳K ۷۸
جدول ۴-۲ مقایسه نتایج روش دوبینن استوکلی ۸۰
جدول ۴-۳ داده‌های دفع نیتروژن از روی کربن HGM 366 در دمای نیتروژن مایع ۸۲
جدول ۴-۴ پارامترهای مدل هرواث کاوازو برای جذب نیتروژن روی کربن فعال ۸۳
جدول ۴-۵ فشارهای نسبی حفرات به کمک روش هرواث کاوازو ۸۴
جدول ۴-۶ نتایج روش هرواث کاوازو ۸۵
جدول ۴-۷ پارامترهای روش تئوری تابعی دانسیته برای جذب نیتروژن روی کربن فعال ۸۹

فهرست علائم

عنوان	علامت اختصاری
مقدار جذب	a
قطبیت مولکول جاذب	a_a
قطبیت مولکول جذب شونده	a_A
ثابت لنارد جونز	A_A ، A_a
مساحت فصل مشترک دو فاز	A_{sf}
انرژی آزاد هلمهولتز اضافی	$\underline{A}^{ex}$
ثابت رابطه کلوین	b
ثابت ساختاری رابطه دوبینن استوکلی	B
حداکثر مقدار ثابت ساختاری	B_0
سرعت نور	c
ثابت رابطه BET	C
قطر معادل ذره	d
قطر اتم جاذب	d_a
قطر اتم جذب شونده	d_A
تابع خطای محلی	er
انرژی مشخصه جذب	E_0
تابع خطای کلی	Er
حد نهایی جذب در یک حفره	F(B)
تابعی جهانی چگالی	F[n(r)]
انرژی آزاد هلمهولتز	$F[\rho]$
ترم دافعه انرژی آزاد هلمهولتز	$F^H[\rho]$
تابع جهانی چگالی	G[n]

تغییر انرژی آزاد گیبس	ΔG
ثابت پلانک	h
حرارت شناوری باقی مانده	h_f
عرض حفره	H
فاصله لایه‌های فرعی داخل حفره	ΔH
تغییر آنتالپی فرآیند جذب	ΔH^{ads}
تغییر آنتاپی تبخیر	ΔH^{vap}
عرض از مبدأ نمودار BET	I_{BET}
ثابت بولتزمن، ثابت تجربی رابطه انرژی مشخصه	k
عدد آووگادرو	K
فاصله دو دیواره حفره	l
جرم الکترون، جرم مولکول	m
وزن مولی جذب شونده	M_{ad}
چگالی	n(r)
مقدار جذب شده	n_{ad} ،n_a
حداکثر عرض حفرات	n_H
مقدار جذب تک لایه	n_m
حداکثر مقدار مول جذب شده در داخل حفره در رابطه دوبینن رادوشکویچ، تعداد نقاط ایزوترم	n_p
تعداد لایه‌ها	N
مقدار جذب شده	N(P)
تعداد اتم‌های جاذب در واحد سطح	N_a
تعداد اتم‌های جذب شده در واحد سطح، عدد آووگادرو در رابطه BET	N_A
فشار	P
فشار اشباع	P_0 ،P_s

پتانسیل برهمکنشی جذب شونده-جذب شونده-جاذب	P_a
فشار محاسبه شده از رابطه هرواث کاوازو	P_{HK}
حرارت دیفرانسیلی جذب	q^{diff}
موقعیت فضایی ذره	$\underline{r}$ ،r’،r
شعاع حفره	r_p
ثابت جهانی گازها	R
شیب نمودار BET	S_{BET}
ماتریس ضرایب (چگالی حفرات)	$S_{H,P}$
تغییر آنتروپی فرآیند جذب	ΔS^{ads}
تغییر آنتروپی به دلیل ترم انتقالی	ΔS^{tr}
تغییر آنتروپی به دلیل ترم چرخشی	ΔS^{rot}
تغییر آنتروپی به دلیل ترم لرزشی	ΔS^{vib}
ضخامت فیلم مایع	t
دما	T
پتانسیل جذبی ناشی از برهم‌کنش جاذب-جذب شونده	U_0
ترم جاذبه برهم‌کنش سیال-سیال	U_{att}
پتانسیل جاذب-جذب شونده	U_{sf}
پتانسیل خارجی	U_{ext}
حجم گاز جذب شده در شرایط استاندارد	V
ماتریس حجم‌های جزئی	$V_{H,P}$
حجم مولی	V_m
حجم گاز مورد نیاز برای جذب تک لایه	V_{mon}
حداکثر حجم حفره	W_0
حجم کلی حفرا میکرو	W_0^0
حجم جذب شده بر اساس روش دوبینن استوکلی	W_{DS}

حجم آزمایشگاهی جذب شده	W_{exp}
تابع وزن	$W_0(r)$
تابع وزن	$W_1(r)$
تابع وزن	$W_2(r)$
حد نهایی جذب	W_∞
فشار نسبی	x

نشانه‌های یونانی

قطبیت الکترونی	$\alpha(q)$
ثابت تابع توزیع	α
ثابت تابع توزیع، ترم انرژی یا ضریب شباهت منحنی مشخصه در رابطه دوبینن رادوشکویچ، سطح اشغال شده توسط مولکول در رابطه تغییر آنتالپی جذب،	β
ثابت تابع توزیع، انرژی آزاد سطحی در رابطه پتانسیل شیمیایی	γ
کشش سطحی گاز مایع	γ_{gl}
فاصله میان لایه‌های صفحات گرافیت	Δ
پتانسیل جذب پلانی	ε
مقدار معادل چاه پتانسیل در برهم‌کنش مولکول‌های سیال-سیال	ε_{ff}
مقدار معادل چاه پتانسیل در برهم‌کنش مولکول‌های جاذب-جاذب	ε_{ss}
ثوابت رابطه قطر معادل ذره	η_i
ضریب لاگرانژ	$\lambda(r)$
طول موج حرارتی دبروگلی	Λ
پتانسیل شیمیایی	μ
فشار دوبعدی	π
چگالی، چگالی تکی	ρ
چگالی مسطح	$\overline{\rho}$

چگالی گاز ایده‌آل	ρ^{IG}
چگالی جاذب (کربن)	ρ_s
فاصله بین اتم گازی و یک ذره در برهم‌کنش صفر	σ
قطر برخورد مولکول جذب شونده	σ_{ff}
قطر برخورد مولکول جاذب	σ_{ss}
پتانسیل خارجی	$\upsilon(r)$
حجم مولی جذب شونده	υ^*
تابع چگالی انرژی	$\Phi(z)$
مغناطیس پذیری جاذب	χ_a
مغناطیس پذیری جذب شونده	χ_A
پتانسیل شیمیایی	Ω
پتانسیل فاز گاز	Ω_g
پتانسیل فاز مایع	Ω_l

زیر نویس‌ها

جاذب	a
جذب شده	ad
خارجی	ext
سیال-سیال	ff
فاز گاز	g
گاز-مایع	gl
فاز مایع	l
تک لایه	mon
جذب شونده	n
حفره	p

اشباع، جاذب	s
جاذب-جاذب	ss

بالانویس‌ها

جذب	ads
دیفرانسیلی	diff
اضافی	ex
کره سخت	H
گاز ایده آل	IG
چرخشی	rot
انتقالی	tr
لرزشی	vib

فصل اول

پیشگفتار