دانشگاه الزهراء(س)

دانشکده علوم پایه

پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد ۱۳۸۳/۶/۲۰

رشته شیمی فیزیک

دارالاطلاعات مرکزی مجلس شورای اسلامی ایران
تقدیم به دارالاطلاعات

عنوان:

محاسبه ضرایب انتقال برای گازهای ایده ال با استفاده از پتانسیل بین مولکولی یوکاوای اصلاح شده

استاد راهنما :

خانم دکتر فریبا سادات هاشمی

استاد مشاور:

خانم دکتر عزت کشاورزی

دانشجو :

فرحناز یعقوبی

بهمن ماه سال ۱۳۸۲

۳۲۵۴۴

شماره .....

تاریخ .....

پیوست .....

جمهوری اسلامی ایران

دانشگاه الزهرا

بسمه تعالی

۸۲۱/۱۸ ۸۲۲/۳

بموجب نامه شماره ..... مورخ ..... جلسه دفاع از پایان نامه

خانم فرحناز یعقوبی دانشجوی رشته شیمی تجزیه دانشکده علوم

شماره دانشجویی ..... درروز شنبه مورخ ۸۲/۱۱/۲۰ تحت عنوان تعیین ضرایب

انتقال برای ۱۴ ترکیب پی آر استاندارد از نیتروژن بین مولکول پوکارای اصلاح شده

در اطاق سمینار بخش علوم برگزار گردید.

ابتدا خانم یعقوبی درمورد موضوع ونتایج پایان نامه صحبت نمودند وسپس به سئوالات اعضاء حاضر در جلسه پاسخ دادند.هیات داوران طی جلسه ای که همزمان تشکیل گردید پس از مشورت نمره دانشجو را ۱۹/۳ وبا امتیاز عالی تعیین ومورد قبول قرارگرفت.

هیات داوران:

۱. استاد راهنما خانم دکتر مریم هاشمی

۲. استاد مشاور خانم دکتر عزت ملک زاده

۳. داور خارجی آقای دکتر علی محمد بارسام

۴. داور داخلی خانم دکتر نائره مرزبان

نام ونام خانوادگی مدیر گروه شیمی امضاء

نام ونام خانوادگی رئیس دانشکده امضاء

یا نماینده دانشکده در شورای تحصیلات تکمیلی دانشگاه

۸۶/۱۱/۲۶

۸۲/۱۲/۲۰

آدرس : تهران - ونک - دانشگاه الزهرا تلفن : ۹ - ۲۲۶۴۰۵۱

تقدیم به:

مادرم که محبتهایش همواره گرمی بخش زندگیم بوده است

و

پدرم که همواره با فداکاریهایش زندگی را به من هدیه داد

همتم بدرقه راه کن ای طایرقدس

که دراز است ره مقصد و من نو سفرم

تقدیر و تشکر

خداوند بزرگ را شاکرم که توفیق تحصیل و انجام این تحقیق را به من عنایت فرمود زیرا بدون عنایت و توجه آن یکتای مهربان هیچ عملی به سرمنزل نخواهد رسید.

اکنون که کارتدوین این پایان نامه به پایان رسید وظیفه خود می دانم مراتب قدردانی و سپاس خودم را از همه کسانی که در جریان تحقیق مرا یاری نمودند ابراز نمایم ،پیشاپیش از کلیه عزیزانی که در انجام این تحقیق مرا یاری نموده و نتوانستم اسامی آنها را ذکر نمایم عذر خواهی می کنم.

از استادراهنمای گرامی سرکار خانم دکتر فریبا السادات هاشمی که وقت گرانبهای خود را در اختیار اینجانب قرار داده و تا پایان کار حسن راهنمایی های ایشان برخوردار بودم ،

از استاد ارجمند سرکار خانم دکتر عزت کشاورز که همواره پذیرای اینجانب بوده و با راهنمایی ها و مشاورت ها خود راهگشای مشکلات من بوده،

از استاد ارجمند جناب آقای دکتر پارسافر،که با اظهار نظر های مفید و سازنده خود بر غنای این تحقیق افزودند،کمال تشکرو قدردانی را دارم.ونیز از استاد ارجمند جناب آقای دکتر حکمت شعار مدیر محترم گروه شیمی که در همه زمینه ها همکاری لازم را نمودند بسیار سپاسگزارم.

چکیده

ضرایب انتقال گاز ها در دانسیته پایین وابسته به دما و پتانسیل بین مولکولی می با شد . بر اساس نظریه جنبشی گازها فرمول هایی که ارائه شده چگونگی وابستگی بین ضرایب انتقال و این پارامتر ها را مشخص می کند. در این پایان نامه از پتانسیل بین مولکولی جدید ارائه شده برای گاز های ایده آل به نام یوکاوا با مغز نرم($SCDY$) استفاده کرده و ضرایب ویسکوزیته ، هدایت گرمایی و نفوذ را برای Ne,Ar,Kr, Xe در محدوده وسیعی از دما ، محاسبه کرده ایم . و با توجه به مقایسه محاسبات با داده های تجربی خطای نسبی متوسط برای پتانسیل SCDY *مربوط به ویسکوزیته* ۰/۷ ± *تا* ۱ ± ، *هدایت گرمایی* ۱ ± *تا* ۲ ± *و ضریب نفوذ* ۱ ± *تا* ۲ ± *گزارش شده است*. برای بررسی صحت کار خود ، این محاسبات را با در نظر گرفتن پتانسیل های تجربی دقیق ارائه شده نیز انجام داده ایم.

عنوان	شماره صفحه

فصل اول: خواص انتقالی

۱-۱- مقدمه ۱

۱-۲- تاریخچه ۱

۱-۳- ضرایب انتقالی ۴

۱-۴- کاربرد پدیده انتقال ۴

۱-۵- انواع تئوریها در بررسی پدیده های ۵

۱-۵-۱-نظریه جنبشی ساده (Simple Kinetic Theory) ۵

۱-۵-۲- نظریه جنبشی دقیق (Rigorous Kinetic Theory) ۶

۱-۵-۲-۱- نظریه چاپمن-انسکوگ ۷

۱-۵-۲-۲-انتگرال برخورد ۸

۱-۵-۲-۳-محاسبه ضرایب انتقال بر اساس نظریه جنبشی دقیق ۱۰

فصل دوم: پتانسیل های بین مولکولی

۲-۱-مقدمه ۱۲

۲-۲-انواع مدل های پتانسیل کروی ۱۴

۲-۲-۱-پتانسیل کره سخت (Hard-sphere) ۱۴

۲-۲-۲-پتانسیل کره نرم (Soft-sphere) ۱۴

۲-۲-۳-پتانسیل چاه مربعی (Square-well) ۱۵

۲-۲-۴-پتانسیل چاه مثلثی (Triangular-well) ۱۵

۲-۲-۵-پتانسیل ساترلند (Sutherland) ۱۶

۲-۲-۶-پتانسیل چاه ذوزنقه ای (Trapezoidal-Well) ۱۶

۲-۲-۷-پتانسیل لنارد - جونز (Lennard - Jones) ۱۶

۲-۲-۸-پتانسیل باکینگهام (Buckingham) ۱۷

۲-۲-۹-انواع پتانسیل های HFD ۱۹

۲-۲-۹-۱-پتانسیل HFD-A, B, C ۲۰

۲-۲-۹-۲-پتانسیل HFD-I ۱۹

۲-۲-۹-۳-پتانسیل HFD-ID1 ۲۰

۲-۲-۱۰- پتانسیل یوکاوا (Yukawa) ۲۰

فصل سوم: قانون حالت های متناظر

۳-۱-اصل حالت متناظر برای خواص انتقالی گازهای بی اثر ۲۲

۳-۲-اصل حالت های متناظر اصلاح شده ۲۲

فصل چهارم: محاسبات و نتایج

۴-۱-روش تحقیق ۲۶

۴-۲-محاسبات و نتایج برای گاز نئون (Ne) ۲۷

۴-۳- محاسبات و نتایج برای گاز آرگون (Ar) ۳۹

۴-۴- محاسبات و نتایج برای گاز کریپتون (Kr) ۵۰

۴-۵- محاسبات و نتایج برای گاز زنون (Xe) ۶۱

فصل پنجم: بحث و نتیجه گیری ۷۲

مراجع ۷۸

پیوست الف

پیوست ب

فهرست جداول

جدول (۴-۱) پارامترهای پتانسیل SCDY و پتانسیل تجربی برای نئون (Ne) ۲۹

جدول (۴-۲) ویسکوزیته محاسبه شده برای نئون و مقایسه با مقادیر تجربی ۳۱

جدول (۴-۳) هدایت گرمایی محاسبه شده برای نئون و مقایسه با مقادیر تجربی ۳۳

جدول (۴-۴) ضریب نفوذ محاسبه شده برای نئون و مقایسه با مقادیر تجربی ۳۵

جدول (۴-۵) پارامترهای پتانسیل SCDY و پتانسیل تجربی برای آرگون (Ar) ۴۰

جدول (۴-۶) ویسکوزیته محاسبه شده برای آرگون و مقایسه با مقادیر تجربی ۴۲

جدول (۴-۷) هدایت گرمایی محاسبه شده برای آرگون و مقایسه با مقادیر تجربی ۴۴

جدول (۴-۸) ضریب نفوذ محاسبه شده برای آرگون و مقایسه با مقادیر تجربی ۴۶

جدول (۴-۹) پارامترهای پتانسیل SCDY و پتانسیل تجربی برای کریپتون (Kr) ۵۱

جدول (۴-۱۰) ویسکوزیته محاسبه شده برای کریپتون و مقایسه با مقادیر تجربی ۵۳

جدول (۴-۱۱) هدایت گرمایی محاسبه شده برای کریپتون و مقایسه با مقادیر تجربی ۵۵

جدول (۴-۱۲) ضریب نفوذ محاسبه شده برای کریپتون و مقایسه با مقادیر تجربی ۵۷

جدول (۴-۱۳) پارامترهای پتانسیل SCDY و پتانسیل تجربی برای زنون (Xe) ۶۲

جدول (۴-۱۴) ویسکوزیته محاسبه شده برای زنون و مقایسه با مقادیر تجربی ۶۴

جدول (۴-۱۵) هدایت گرمایی محاسبه شده برای زنون و مقایسه با مقادیر تجربی ۶۶

جدول (۴-۱۶) ضریب نفوذ محاسبه شده برای زنون و مقایسه با مقادیر تجربی ۶۸

فهرست اشکال

شکل (۴-۱) در صد انحراف ویسکوزیته نئون ۳۶

شکل (۴-۲) در صد انحراف هدایت گرمایی نئون ۳۷

شکل (۴-۳) در صد انحراف ضریت نفوذ نئون ۳۸

شکل (۴-۴) در صد انحراف ویسکوزیته آرگون ۴۷

شکل (۴-۵) در صد انحراف هدایت گرمایی آرگون ۴۸

شکل (۴-۶) در صد انحراف ضریت نفوذ آرگون ۴۹

شکل (۴-۷) در صد انحراف ویسکوزیته کریپتون ۵۸

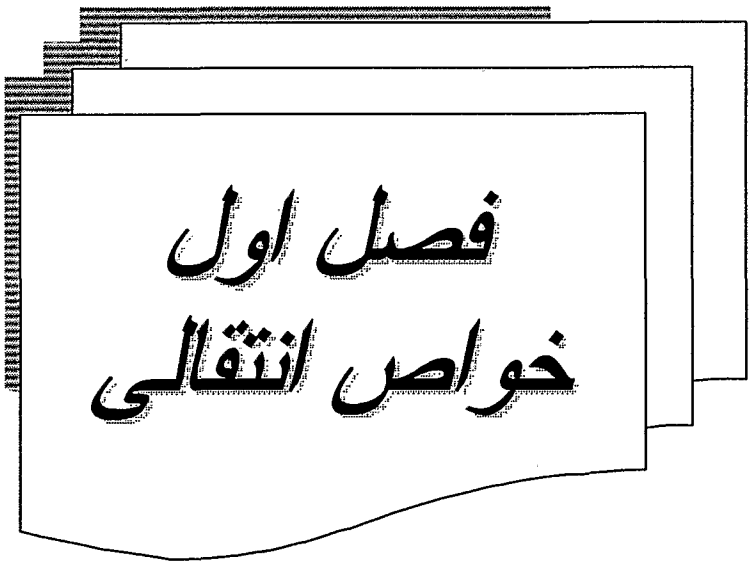
شکل (۴-۸) در صد انحراف هدایت گرمایی کریپتون ۵۹

شکل (۴-۹) در صد انحراف ضریت نفوذ کریپتون ۶۰

شکل (۴-۱۰) در صد انحراف ویسکوزیته زنون ۶۹

شکل (۴-۱۱) در صد انحراف هدایت گرمایی زنون ۷۰

شکل (۴-۱۲) در صد انحراف ضریت نفوذ زنون ۷۱


فصل اول
خواص انتقالی

۱-۱- مقدمه

خواص انتقالی ، پدیده هایی را شامل می شوند که با انتقال یک خاصیت فیزیکی، در سیستم غیر تعادلی به وسیله حرکت مولکولها همراه است. از جمله پدیده های انتقالی می توان به نفوذ، ویسکوزیته و هدایت گرمایی اشاره کرد.

پدیده نفوذ با انتقال جرم از یک منطقه به منطقه دیگر همراه می باشد که این انتقال در نتیجه اختلاف غلظت است. در صورتیکه اختلاف گرما باعث انتقال جرم شود با پدیده انتقالی نفوذ حرارتی یا اثر سورت[1] روبرو هستیم. نفوذ یک گاز، تحت شرایط معین، از خواص مشخصه آن گاز است و با استفاده از قانون گراهام توسط فرمول زیر نیز قابل محاسبه است:

$$\frac{v_1}{v_2}=\sqrt{\frac{d_1}{d_2}} \qquad (۱-۱)$$

v_1 سرعت متوسط گاز شماره یک و v_2 سرعت متوسط گازشماره دوم، d_1 و d_2 هم به ترتیب نفوذ گاز شماره یک ودو هستند.

پدیده ویسکوزیته با انتقال اندازه حرکت خطی از یک نقطه به نقطه دیگر همراه است که در اثر اختلاف در سرعت ذرات می باشد و در نهایت هدایت گرمایی با انتقال انرژی در نتیجه اختلاف در دما همراه است. اگر انتقال انرژی به خاطر اختلاف غلظت صورت بگیرد به این پدیده انتقالی ایجاد شده، اثر حرارتی نفوذ یا دوفر[2] گویند.

۱-۲-تاریخچه

برای به دست آوردن ضرایب انتقال مثل ویسکوزیته، هدایت گرمایی و نفوذ از مدتها پیش از طریق تجربی و نظری تلاش شده است.

[1] Soret
[2] Dufour

فلین[1] و همکاران در سال ۱۹۶۳ ضریب ویسکوزیته را برای نیتروژن، هلیوم، نئون و آرگون در محدوده دمایی C ° ۷۸/۵- تا C ° ۱۰۰- تحت فشار ۱۰۰ اتمسفر توسط دستگاه ویسکومتر اندازه گیری کردند [۱۰].

در سال ۱۹۶۵ تراپنیرز[2] و همکاران ویسکوزیته کریپتون را با روش آشکار کردن[3] در محدوده دمایی C ° ۲۵ و C ° ۷۵ در فشار بالای ۲۰۰ اتمسفر و برای دمای C ° ۱۲۵ تحت فشار ۱۹۰۰ و ۱۳۰۰ اتمسفر اندازه گیری کردند[۱۱].

داو[4] و اسمیت[5] در سال ۱۹۶۹ ویسکوزیته گازهای نادر و نیتروژن را در محدوده دمایی ۳۰۰ تا C ° ۱۶۰۰ از طریق تجربی اندازه گیری کردند، نتایج نشان داد که اندازه گیری های قبلی در C ° ۱۶۰۰ تقریبا ۶ در صد خطا داشته که در اینجا این خطا اصلاح شده، همچنین در این سال وگتس[6] و همکاران ضریب نفوذ را برای آرگون با توجه به پتانسیل لنارد جونز محاسبه کردند [۱۲-۱۳].

در سال ۱۹۷۰ ویسکوزیته نئون توسط گوارا[7] و همکاران، ویسکوزیته کریپتون و زنون توسط گلدبلات[8] و همکارانش از طریق روش جریان موئین و دستگاه ویسکومتر اندازه گیری شد [۱۴-۱۶].

کیستن[9] و همکاران در سال ۱۹۷۲ نتایج جدیدی از ویسکوزیته گازهای بی اثر در فشار یک اتمسفر در محدوده دمایی C ° ۷۰۰-۲۵ به وسیله دستگاه ویسکومتر گزارش کردند [۱۷].

ضریب نفوذ نئون در سال ۱۹۷۲ در محدوده دمایی ۷۷ تا C ° ۱۴۰۰ توسط استنلی ویسمن[10] اندازه گیری شد [۱۸].

---

[1] Flynn
[2] Trappeniers
[3] Transpiration method
[4] Dawe
[5] Smith
[6] Vugts
[7] Guenara
[8] Goldblatt
[9] Kistin
[10] Stanly Weissman

در سال ۱۹۸۴ کستین و همکاران خواص انتقالی پنج گاز بی اثر ترکیب دوتایی آنها و مخلوط چند تایی آنها را در دانسیته پایین، با استفاده از قانون حالات متناظر و معادلات همبستگی محاسبه کردند. همچنین در این سال ضریب ویسکوزیته توسط وگل[1] و همکارانش نیز محاسبه شد [۱۹-۲۰]. همچنین در سال ۱۹۸۷ بوشهری و همکاران با استفاده از قانون حالات متناظر و معادلات همبستگی، ضریب دوم ویریال (B)، ویسکوزیته (η) و ضریب نفوذ (D) را برای نئون و O_2, NO, CO, N_2O, CO_2, CH_4, CF_4, SF_6, C_2H_4 و C_2H_6 در دانسیته پایین محاسبه کردند [۲۱].

بیچ[2] و همکاران در سال ۱۹۹۰، ویسکوزیته و هدایت گرمایی را برای گازهای تک اتمی خالص از نقطه جوش نرمال آنها تا ۵۰۰K در حد دانسیته صفر و فشار ۱۳۲۵ حدود ۱۰٪ مگا پاسکال محاسبه کردند [۲۲].

حقیقی و به نژاد نیز در سال ۲۰۰۱ ضریب ویسکوزیته را برای گاز هیدروژن از طریق پتانسیل دقیق HFD محاسبه کردند [۲۳].

در سال ۲۰۰۲ حقیقی، فتح آبادی و پیری از طریق روش نیمه تجربی وارونگی در دانسیته پایین ضرایب انتقال را برای ترکیب دوتایی گاز CO با گازهای بی اثر، محاسبه کردند [۲۴].

که هدف ما نیز از این پایان نامه محاسبه ضرایب انتقال گاز های بی اثر (Ne,Ar,Kr,Xe) از طریق پتانسیل بین مولکولی یوکاوا با مغز نرم(SCDY) می باشد، که این محاسبات با توجه به فرمول های ارائه شده از طریق نظریه جنبشی گازها صورت گرفته است.علاوه بر پتانسیل معرفی شده از پتانسیل های دقیق تجربی ارائه شده برای گاز های بی اثر نیز ضرایب انتقال را محاسبه کرده ایم برای انجام محاسبات از برنامه کامپیوتری Oharo و Smith استفاده شده است.

[1] Vogel
[2] Bich