بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه یزد

دانشکده علوم

گروه شیمی

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

شیمی فیزیک

استفاده از یک معادله حالت اختلالی جدید برای محاسبه خواص ترمودینامیکی آلکان‌های خطی زنجیری

استاد راهنما: **دکتر حسین فرخ‌پور**

استاد مشاور: **دکتر محمدرضا نوربالا**

پژوهش و نگارش: **مریم مسعودی**

آذر ماه ۸۸

تقدیم به ساحت مقدس امام عصر(عج)

که جهان تشنه ی عدالت اوست.

با سپاس فروان از:

پدر و مادر عزیز و بزرگوارم که همیشه مدیون مهربانی‌هاشان خواهم بود.

تقدیر:

پروردگار مهربان را سپاس می گویم که در پناه الطاف خاصه اش، توفیق آن را یافتم تا در راه کسب علم و دانش، قدمی هرچند ناچیز بردارم.

درون بیکران خود را نثار خانواده ام می کنم که با پایه گذاری خشت خشت بنای فکری ام، مرا در امر تحصیل یاری کرده و هرچه دارم از وجود مقدس شان است.

از دوست عزیز و مهربانم، سرکار خانم حوافقیه که همیشه به عنوان یک دوست دلسوز و مهربان مرا همراهی می کند سپاس گزارم.

بر خود واجب می دانم که به پاس تلاش و لطف همیشگی استاد راهنمای بزرگوارم، جناب آقای دکتر فرخ پور، که با راهنمایی های عالمانه شان در پربارتر شدن این پژوهش روشنگر راهم بودند، از ایشان کمال تشکر و امتنان را داشته باشم. همچنین از استاد مشاورم، جناب آقای دکتر نوربالا صمیمانه تشکر می کنم، و از خدای بزرگ برای این دو بزرگوار و همه اساتید دانشکده شیمی دانشگاه یزد، عزت و سربلندی خواستارم. در نهایت از تمامی عزیزانی که در این پروژه مرا همراهی کردند تشکر می نمایم.

مریم مسعودی- دی ماه ۱۳۸۸

چکیده

در این پایان نامه از یک معادله حالت کاملاً اختلالی که در سال ۲۰۰۸ میلادی توسط فرخ‌پور و همکاران برای سیالات زنجیری کره سخت، بر پایه‌ی نظریه اختلال، ارائه شد، برای محاسبه ضریب تراکم‌پذیری و پیش‌بینی تعادل مایع- بخار آلکان‌های خطی و پرفلوروآلکان‌های خطی استفاده می‌شود. در این پژوهش مولکول‌ها را به‌صورت زنجیرهای متشکل از کره‌های آزاد به‌هم متصل شده که از طریق یک پتانسیل چاه مربعی بسط داده شده‌ی بین مولکولی مکان- مکان با هم برهم‌کنش می‌کنند در نظر می‌گیریم. ضرایب پتانسیل بین مولکولی مکان- مکان ترکیبات از داده‌های ضریب تراکم‌پذیری در بالای دمای بحرانی تعیین می‌شوند. این ضرایب به‌طور نسبتاً خوبی قادر به پیش‌بینی منحنی‌های همزاد تعادل مایع- بخار آلکان‌های خطی و پرفلوروآلکان‌های در نظر گرفته شده در این پژوهش هستند. روابط ریاضی ساده‌ای بین ضرایب پتانسیل بین مولکولی مکان- مکان و وزن مولکولی ترکیبات وجود دارد که این روابط توانایی پیش‌بینی داده‌های ضریب تراکم‌پذیری و تعادل مایع- بخار و کمیت‌های ترمودینامیکی از قبیل آنتالپی، آنتروپی و انرژی داخلی آلکان‌های خطی و پرفلوروآلکان‌های خطی سنگین‌تر را دارند.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: مقدمه‌ای بر مباحث نظری..... ۱

۱-۱- معادله حالت..... ۲

۱-۲- استخراج نظری معادله حالت..... ۴

۱-۳- تابع توزیع شعاعی..... ۶

۱-۴- نقش نیروهای جاذبه و دافعه در ساختار سیال چگال..... ۱۰

۱-۵- نظریه اختلال مایعات..... ۱۳

۱-۵-۱- نظریه اختلال زوانزیگ..... ۱۳

۱-۵-۲- نظریه اختلال بارکر- هندرسون..... ۱۷

۱-۵-۳- نظریه اختلال چندلر- ویکز- اندرسن..... ۲۲

۱-۶- انواع پتانسیل‌های برهم‌کنش بین مولکولی..... ۲۵

۱-۶-۱- پتانسیل کره سخت..... ۲۵

۱-۶-۲- پتانسیل کره نرم..... ۲۶

۱-۶-۳- پتانسیل چاه مربعی..... ۲۶

۱-۶-۴- پتانسیل ساترلند..... ۲۷

عنوان	صفحه

۱-۶-۵- پتانسیل لنارد- جونز..... ۲۸

فصل دوم: معادلات حالت جدید برای سیالات زنجیری..... ۲۹

۲-۱- مقدمه..... ۳۰

۲-۲- معرفی چند معادله حالت جدید برای سیالات با مولکول‌های زنجیری..... ۳۰

۲-۲-۱- معادله حالت برای سیالات شامل مولکول‌های زنجیری جور هسته سخت با دامنه‌ی پتانسیل جاذبه متغیر..... ۳۰

۲-۲-۲- معادله حالت برای سیالات زنجیری ناجور هسته سخت و مخلوط شامل مولکول‌های زنجیری جور هسته سخت با پتانسیل جاذبه متغیر..... ۴۰

۲-۲-۲-۱- مخلوط سیالات حاوی مولکول‌های زنجیری سخت جور هسته..... ۴۱

۲-۲-۲-۲- سیالات حاوی مولکول‌های زنجیری سخت ناجور هسته..... ۴۶

۲-۲-۳- نظریه آماری سیالات تجمعی..... ۵۰

۲-۲-۴- نظریه آماری سیالات تجمعی با طول پتانسیل جاذبه متغیر (SAFT-VR). ۵۲

۲-۳- بسط معادله حالت SAFT-VR به آلکان‌های خطی..... ۵۴

۲-۴- معرفی یک معادله حالت تجربی برای آلکان‌های خطی..... ۵۶

فصل سوم: محاسبه‌ی خواص ترمودینامیکی آلکان‌ها و پروفلوروآلکان‌های خطی با استفاده از یک معادله حالت جدید..... ۵۸

عنوان	صفحه

۳-۱- مقدمه ۵۹

۳-۲- ضریب تراکم‌پذیری آلکان‌های خطی ۶۰

۳-۳- برازش‌سازی ضرایب پتانسیل بین مولکولی ESW برای‌آلکان‌های خطی ۶۲

۳-۳-۱- برازش ضریب تراکم‌پذیری با λ و α ثابت ۶۴

۳-۳-۲- برازش ضریب تراکم‌پذیری هنگامی‌که همه ضرایب پتانسیل نظیم‌پذیراند.. ۷۰

۳-۳-۳- مقایسه بین ضرایب تراکم‌پذیری پیش‌بینی شده با استفاده از ضرایب پتانسیل مکان- مکان ESW برازش شده از دو روش (الف) و (ب) ۷۳

۳-۴- تعیین ثابت‌های بحرانی‌آلکان‌های خطی ۷۴

۳-۵- پیش‌بینی رفتار فازی و تعادل مایع– بخار آلکان‌های خطی ۷۷

۳-۶- روابط بین ضرایب پتانسیل مکان-مکان ESW و وزن مولکولی آلکان‌های خطی. ۸۴

۳-۷- خواص ترمودینامیکی آلکان‌های‌خطی ۸۸

۳-۸- برازش‌سازی ضرایب پتانسیل بین مولکولی ESW برای پرفلورآلکان‌های‌خطی..... ۹۵

۳-۹- پیش‌بینی رفتار تعادل مایع– بخار پرفلوروآلکان‌های خطی ۹۷

۳-۱۰- تعیین ثابت‌های بحرانی پرفلوروآلکان‌های خطی ۹۸

۳-۱۱- روابط بین وزن مولکولی و ضرایب پتانسیل ESW پرفلورآلکان‌های خطی..... ۱۰۰

عنوان	صفحه

۳-۱۲- نتیجه‌گیری ۱۰۲

پیوست **۱۰۳**

منابع و مآخذ **۱۲۰**

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول (۱-۱) مقایسه ثابت‌های بحرانی محاسبه شده از نظریه اختلال بارکر- هندرسون با نتایج دینامیک مولکولی برای سیال پتانسیل چاه مربعی با λ=۱/۵ ..... ۲۰

جدول (۱-۲) مقایسه ثابت‌های بحرانی سیال لنارد– جونز محاسبه شده براساس نظریه بارکر-هندرسون با نتایج دینامیک مولکولی و نتایج تجربی سیال واقعی آرگون..... ۲۱

جدول (۲-۱). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده برای سیال چهارمر چاه مربعی با λ = ۱/۵ با داده‌های دینامیک مولکولی مونت کارلو ارائه شده توسط پادرس و همکاران..... ۳۸

جدول (۲-۲). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه‌شده برای سیال دیمر یوکاوا با λ= ۱/۸ با دینامیک مولکولی وانگ و همکاران..... ۳۹

جدول (۲-۳). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده برای مخلوط‌های مونومر چاه مربعی در دمای کاهش‌یافته ۲، $\varepsilon_{22}/\varepsilon_{11}$ = ۱/۵ و $\lambda_{11}=\lambda_{22}=\lambda_{12}$ = ۱/۵، با نتایج شبیه‌سازی مونت کارلو..... ۴۴

جدول (۲-۴). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده برای مخلوط‌های دیمر چاه مربعی در دمای کاهش‌یافته T^* = ۲ و $\lambda_{11}=\lambda_{22}=\lambda_{12}$ = ۱/۵، با داده‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی..... ۴۵

جدول (۲-۵). ضریب تراکم‌پذیری محاسبه‌شده برای سیال ناجورهسته چاه مربعی از معادله (۲-۵۰) در T^* = ۳ و $\lambda_{11}=\lambda_{22}=\lambda_{12}$ = ۱/۵ با نتایج دینامیک مولکولی... ۴۸

عنوان **صفحه**

جدول (۲-۶). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده برای سیالات ناجورهسته دسته‌ای چاه مربعی از معادله (۲-۴۹) در دمای کاهش‌یافته $T^* = ۳$ و $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \lambda_{12} = ۱/۵$ با نتایج دینامیک مولکولی(EGFD)..... ۴۹

جدول (۲-۷) ضرایب پتانسیل بین مولکولی چاه مربعی برای معادله حالت SAFT-VR.... ۵۴

جدول (۳-۱) ضرایب پتانسیل ESW برازش شده با روش برازش الف..... ۶۴

جدول (۳-۲) ضرایب پتانسیل ESW برازش شده با روش برازش (ب)..... ۷۱

جدول (۳-۳) مقادیر ثابت‌های بحرانی آلکان‌های خطی..... ۷۵

جدول (۳-۴) فشاربخار آلکان‌های خطی. ستون الف، نتایج محاسبه شده از ضرایب جدول (۳-۱) و ستون ب، نتایج محاسبه شده از ضرایب جدول (۳-۲) و ستون ج، داده‌های تجربی را نشان می‌دهد. اعداد داخل پرانتز درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۰۴

جدول (۳-۵) دانسیته مایع آلکان‌های خطی. ستون الف، نتایج محاسبه شده از ضرایب جدول (۳-۱) و ستون ب، نتایج محاسبه شده از ضرایب جدول (۳-۲) و ستون ج، داده‌های تجربی را نشان می‌دهد. اعداد داخل پرانتز درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۰۶

جدول (۳-۶). مقادیر آنتروپی، آنتالپی و انرژی داخلی در حالت مرجع..... ۸۹

جدول (۳-۷). آنتروپی اتان در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۰۸

عنوان **صفحه**

جدول (۳-۸). آنتروپی پروپان در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۰۹

جدول (۳-۹). آنتروپی بوتان خطی در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۰

جدول (۳-۱۰). آنتالپی اتان در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۱

جدول (۳-۱۱). آنتالپی پروپان در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۲

جدول (۳-۱۲). آنتالپی بوتان خطی در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۳

جدول (۳-۱۳). انرژی داخلی اتان در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۴

عنوان صفحه

جدول (۳-۱۴). انرژی داخلی پروپان در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۵

جدول (۳-۱۵). انرژی داخلی بوتان خطی در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۶

جدول (۳-۱۶). آنتروپی پروپان در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۲)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۷

جدول (۳-۱۷). آنتالپی پروپان در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۲)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۸

جدول (۳-۱۸). انرژی داخلی پروپان در دو دمای متفاوت، ستون الف) مقادیر محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۲)، ستون ب) داده‌های تجربی متناظر و ستون ج) درصد خطا را بیان می‌کند..... ۱۱۹

جدول (۳-۱۹) ضرایب پتانسیل ESW برازش شده برای پرفلوروآلکان‌های خطی..... ۹۵

جدول (۳-۲۰) مقادیر ثابت‌های بحرانی پرفلوروآلکان‌های خطی..... ۹۸

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل (۱-۱). ضریب تراکم‌پذیری برای چند گاز در دمای ۲۷۳/۱۵ K ۳

شکل (۱-۲). ضریب تراکم‌پذیری برای یک گاز در چند دما..... ۳

شکل (۱-۳). تابع توزیع شعاعی برای یک سیال لنارد- جونز(۱۲-۶) که از طریق محاسبات دینامیک مولکولی تعیین شده است..... ۹

شکل (۱-۴). تابع توزیع شعاعی سیال کره سخت در دانسیته‌ی نزدیک به نقطه‌ی انجماد. ۱۰

شکل (۱-۵). ضریب ساختار به صورت تابعی از بردار موج $k\sigma$..... ۱۲

شکل (۱-۶). مقایسه نتایج به‌دست آمده از نظریه اختلال بارکر- هندرسون برای سیال چاه مربعی (خطوط پر) با نتایج دینامیک مولکولی و مونت‌کارلو (نقاط) در دماهای کاهش یافته متفاوت. ۲۰

شکل (۱-۷). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری محاسبه شده از نظریه اختلال بارکر- هندرسون برای سیال لنارد- جونز (خط پر) با نتایج حاصل از محاسبات دینامیک مولکولی (نقاط) در دماهای کاهش‌یافته متفاوت..... ۲۲۱

شکل (۱-۸). تفکیک پتانسیل لنارد– جونز به پتانسیل مرجع $u_0(r)$ و پتانسیل اختلال $u^{(1)}(r)$ براساس نظریه اختلال WCA..... ۲۳

شکل (۱-۹). پتانسیل برهم‌کنش بین مولکولی براساس مدل کره سخت..... ۲۵

شکل (۱-۱۰). پتانسیل برهم‌کنش بین مولکولی براساس مدل کره نرم..... ۲۶

عنوان	صفحه

شکل (۱-۱۱). پتانسیل برهم‌کنش بین مولکولی براساس مدل چاه مربعی..... ۲۷

شکل (۱-۱۲). پتانسیل برهم‌کنش بین مولکولی براساس مدل پتانسیل ساترلند..... ۲۷

شکل (۱-۱۳). پتانسیل برهم‌کنش بین مولکولی براساس مدل پتانسیل لنارد- جونز..... ۲۸

شکل (۲-۱). سیال زنجیری جور هسته سخت..... ۳۱

شکل (۲-۲). تابع پتانسیل ESW..... ۳۲

شکل (۲-۳). شمایی از دو مولکول زنجیری جور هسته و برهم‌کنش‌های آن..... ۳۴

شکل (۲-۴). سه نوع مولکول زنجیری ناجور هسته سخت..... ۴۰

شکل (۲-۵). مخلوط سیال زنجیری جور هسته سخت..... ۴۰

شکل (۲-۶). مقایسه منحنی‌های همزاد مایع- بخار پیش‌بینی شده توسط معادله حالت SAFT-VR برای آلکان‌های خطی (۸ تا ۱ = C) با نتایج تجربی. دایره‌ها نشان‌دهنده نتایج تجربی و خط‌پر نشان‌دهنده پیش‌بینی SAFT-VR است..... ۵۵

شکل (۳-۱). ضریب تراکم‌پذیری الف) اتان، ب) پروپان نسبت به دانسیته در دماهای متفاوت..... ۶۱

شکل (۳-۲). ضریب تراکم‌پذیری آلکان‌های خطی شامل، متان تا اکتان نسبت به الف) فشار و ب) دانسیته در دمای ۶۰۰ K..... ۶۲

شکل (۳-۳) مقایسه ضریب تراکم‌پذیری پیش‌بینی شده توسط معادله حالت (۲-۲۳)، با استفاده از ضرایب گزارش شده در جدول (۳-۱) با نتایج تجربی..... ۶۶

عنوان **صفحه**

شکل (۳-۴). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری پیش‌بینی شده توسط معادله حالت (۲-۲۳)، با استفاده از ضرایب گزارش شده در جدول (۳-۱)(خطوط‌پر) با نتایج تجربی(نمادها) برای پنتان‌خطی و هپتان‌خطی در دماهای متفاوت..... ۶۷

شکل (۳-۵). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری پیش‌بینی شده توسط معادله حالت (۲-۲۳)، با استفاده از ضرایب گزارش شده در جدول (۳-۱)(خطوط‌پر) با نتایج تجربی(نمادها) برای اتان و بوتان‌خطی در دماهای متفاوت..... ۶۸

شکل (۳-۶). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری پیش‌بینی شده توسط معادله حالت (۲-۲۳)، با استفاده از ضرایب گزارش شده در جدول (۳-۱)(خطوط‌پر) با نتایج تجربی(نمادها) برای هگزان‌خطی و اکتان‌خطی در دماهای متفاوت..... ۶۹

شکل (۳-۷). تغییرات ضریب n نسبت به تعداد اتم‌های کربن هر آلکان(C) محاسبه شده از روش برازش الف. نقاط مقادیر n محاسبه شده را نشان می‌دهد و خط نشان‌دهنده برازش خطی است..... ۷۰

شکل (۳-۸). بخش جاذبه پتانسیل ESW محاسبه شده برای پنتان خطی، هگزان خطی، هپتان خطی و اکتان خطی..... ۷۲

شکل (۳-۹). تغییرات پارامتر n نسبت به C محاسبه شده از روش ب. نقاط مقادیر n محاسبه شده را نشان می‌دهد و خط‌پر نشان‌دهنده برازش خطی است..... ۷۲

شکل (۳-۱۰). مقایسه ضریب تراکم‌پذیری تجربی سیال پنتان خطی (نقاط) با ضریب تراکم‌پذیری پیش‌بینی شده توسط معادله حالت (۲-۲۳) با استفاده از ضرایب جدول (۳-۱)(خط‌چین) و ضرایب جدول (۳-۲)(خط‌توپر)..... ۷۳

عنوان **صفحه**

شکل (۳-۱۱). مقایسه دمای بحرانی پیش‌بینی شده در با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) با نتایج پیش‌بینی شده از معادله حالت SAFT-VR و نتایج تجربی..... ۷۶

شکل (۳-۱۲). منحنی همزاد مایع- بخار..... ۷۸

شکل (۳-۱۳). منحنی‌های هم‌دمای متان زیر دمای بحرانی در چند دمای متفاوت..... ۷۸

شکل (۳-۱۴) ساختار ماکسول..... ۷۹

شکل (۳-۱۵). منحنی‌های همزاد مایع– بخار برای آلکان‌های‌خطی..... ۸۰

شکل (۳-۱۶). منحنی‌های همزاد مایع– بخار برای آلکان‌های‌خطی..... ۸۰

شکل (۳-۱۷) مقایسه‌ی منحنی‌های همزاد مایع- بخار بوتان خطی..... ۸۱

شکل (۳-۱۸). منحنی‌های همزاد مایع-بخار برای پروپان، بوتان خطی و پنتان خطی..... ۸۲

شکل (۳-۱۹). مقایسه‌ی رفتار $ln(p)$ برحسب عکس دما برای نتایج محاسبه شده بااستفاده ازمعادله حالت (۲-۲۳) و نتایج تجربی برای الف) اتان، ب) پروپان، ج) بوتان‌خطی و د) پنتان‌خطی..... ۸۳

شکل (۳-۲۰). وابستگی ضرایب پتانسیل ESW به وزن مولکولی(MW).الف) $n\sigma^3$ و ب) $n(\varepsilon/k)$..... ۸۴

شکل (۳-۲۱). مقایسه منحنی‌های همزاد مایع- بخار الف) نونان خطی و ب) دکان خطی. ۸۶

شکل (۳-۲۲). وابستگی ضرایب پتانسیل ESW به وزن مولکولی الف) $MW\sigma^3$، ب) $MW(\lambda)$، ج) $MW(\varepsilon/k)$ و د) $MW(\alpha)$..... ۸۷

عنوان صفحه

شکل (۳-۲۳). مقایسه‌ی آنتروپی، انتالپی و انرژی داخلی اتان محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)(خطوط توپر) و داده‌های تجربی متناظر(نقاط) در دماهای متفاوت..... ۹۰

شکل (۳-۲۴). مقایسه‌ی آنتروپی، انتالپی و انرژی داخلی پروپان محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)(خطوط توپر) و داده‌های تجربی متناظر(نقاط) در دماهای متفاوت..... ۹۱

شکل (۳-۲۵). مقایسه‌ی آنتروپی، انتالپی و انرژی داخلی بوتان خطی محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۱)(خطوط توپر) و داده‌های تجربی متناظر(نقاط) در دماهای متفاوت..... ۹۲

شکل (۳-۲۶). مقایسه‌ی آنتروپی، انتالپی و انرژی داخلی پروپان محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۲)(خطوط توپر) و داده‌های تجربی متناظر(نقاط) در دماهای متفاوت..... ۹۳

شکل (۳-۲۷). مقایسه‌ی آنتروپی، انتالپی و انرژی داخلی نرمال‌بوتان محاسبه شده با استفاده از معادله حالت (۲-۲۳) و ضرایب جدول (۳-۲) و داده‌های تجربی متناظر. ۹۴

شکل (۳-۲۸). مقایسه‌ی ضریب تراکم‌پذیری پیش‌بینی شده توسط معادله حالت (۲-۲۳) (خطوط‌توپر) با نتایج تجربی (نمادها) برای الف) پرفلورومتان، ب) پرفلورواتان و ج) پرفلورپروپان در چند دمای متفاوت..... ۹۶

شکل (۳-۲۹). تغییرات ضریب n نسبت به تعداد اتم کربن (C). نقاط مقادیر n محاسبه شده را نشان می‌دهد و خط نشان‌دهنده برازش خطی است..... ۹۷

عنوان صفحه

شکل (۳-۳۰). منحنی‌های همزاد مایع- بخار برای پرفلورواتان و پروفلوروپروپان..... ۹۸

شکل (۳-۳۱). مقایسه ثابت‌های بحرانی پیش‌بینی شده با استفاده از معادله حال (۲-۲۳)، با نتایج پیش‌بینی شده از معادله حالت SAFT-VR و نتایج تجربی برای پرفلوروآلکان‌ها..... ۹۹

شکل (۳-۳۲). وابستگی ضرایب پتانسیل بین مولکولی به وزن مولکولی. الف) $MW(\lambda)$، ب) $MW(\sigma^3)$، ج) $MW(\varepsilon/k)$ و د) $MW(\alpha)$..... ۱۰۱