

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



ص ۱۱ / ۱۳۸۰

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده شیمی

استخراج معادله حالت برای سیال فوق بحرانی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

۱۰۰۱۸

مریم نجات

استاد راهنما:

دکتر غلامعباس پارسافر

۳۲۷۸۰

شهریور ۱۳۷۹



دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک خانم مریم نجات

تحت عنوان

استخراج معادله حالت برای سیال فوق بحرانی

در تاریخ ۷۹/۸/۹ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب قرار گرفت.

۱- استاد راهنمای رساله (رئیس هیئت داوران)

۲- استاد مشاور، دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان

۴- استاد داور، دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان

۳- استاد داور، دانشکده مهندسی شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان

۵- سرپرست تحصیلات تکمیلی دانشکده

دکتر غلامعباس پارسا

دکتر بیژن نجفی

دکتر سید حسن قاضی

دکتر سید محمد قریبی

دکتر غلامعباس پارسا

ستایش و حمد

معشوق مطلق را حمد و ستایش سزااست جل جلاله که تمام
موجودات عاشق مقید اویند. همه راه اوست می پویند و وصل
اوست می جویند و حمد اوست می گویند.

ان من شيء الی یسبح بمره

هر برگی از دفتر معرفتش آیتی است و هر گیاهی در بیدای
وحدتش فراشته رأیتی، با این همه عالمی متفکرانند و جهانی
به دیده حیرت نگران که هر چه جهد بیش نمایند و بیشتر
گرایند منزل مقصود دورتر شود و دیده معرفت بی نورتر.

دردا که ما ز مقصود خود دورتر شریم

نزدیکتر هر آنچه نهادیم کام را

سپاسگذاری

در اینجا لازم میدانم از کلیه افرادی که مرا در انجام این رساله یاری رسانده اند تشکر و قدر دانی نمایم. بخصوص از استاد ارجمند جناب آقای دکتر غلامعباس پارسافر استاد راهنما، جناب آقای دکتر بیژن نجفی استاد مشاور و جناب آقای دکتر سید حسن قاضی عسگر استاد مدعو و همچنین جناب آقای دکتر سید محمد قریشی استاد مدعو که خواندن پایان نامه را متقبل شدند و همچنین از سرکار خانم دکتر عزت کشاوری که در انجام این پروژه مرا یاری رساندند کمال تشکر را دارم.

تقدیم به

تجلیگاہ حمایت خداوند پدرم و مظهر لطف و مہربانی
مادرم به آنانکہ ہستیشان را چراغ ہدایت راہم قرار
دادند و مروارید پر تلالؤ چشمانشان را بدرقہ راہم کردند

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات ،
ابتکارات و نوآوریهای ناشی از تحقیق موضوع
این پایان نامه (رساله) متعلق به دانشگاه صنعتی
اصفهان است.

فهرست مطالب

	عنوان
	تصویب نامه
	تشکر و قدردانی
	واگذاری حقوق
	فهرست مطالب
	فهرست اشکال
	فهرست جداول
	فهرست نمادها
	چکیده
	فصل اول: ناحیه بحرانی و فوق بحرانی
۱	۱-۱ بررسی پدیده بحرانی با استفاده از نمودار $p-V$
۴	۲-۱ تعیین تجربی دمای بحرانی
۵	۳-۱ نقطه بحرانی و خواص آن
	۳-۱ (الف) نقطه بحرانی و رفتار سیال در این نقطه
۶	۳-۱ (ب) نقطه بحرانی و کدبری بحرانی
۸	۳-۱ (ج) نقطه بحرانی و تبدیل فاز
	۱-تبدیل فاز مرتبه اول
	۲-تبدیل فاز مرتبه دوم
۹	
۱۰	۳-تبدیل فاز λ شکل
۱۱	۳-۱ (د) دید مولکولی تبدیل فاز
۱۲	۳-۱ (ه) نقطه بحرانی و نماهای بحرانی
۱۵	۴-۱ نیروهای بین مولکولی
۱۶	۱-۴-۱ پتانسیل جفت و جمع پذیری جفت گونه
	۲-۴-۱ انرژی پیکربندی و جمع ناپذیری
۱۷	۳-۴-۱ منشا نیروهای بین مولکولی
	۳-۴-۱ (الف) سهم الکتروستاتیکی
۱۸	۳-۴-۱ (ب) سهم القایی
	۳-۴-۱ (ج) سهم پراکندگی
۲۰	۴-۴-۱ محاسبه انرژی الکتروستاتیکی برد بلند
۲۱	۵-۱ ساختار سیال و تابع توزیع شعاعی و ناحیه بحرانی
۲۴	۱-۵-۱ تابع توزیع شعاعی
۲۵	۶-۱ تابع همبستگی مستقیم و غیر مستقیم و ناحیه بحرانی
۲۶	۷-۱ ناحیه فوق بحرانی و اهمیت آن
	۱-۷-۱ رفتار خواص ترمودینامیکی سیستم در ناحیه فوق بحرانی
۲۷	۸-۱ کاربردهای سیال فوق بحرانی
	فصل دوم: معادلات حالت
۲۹	۱-۲ معادلات حالت ویژه سیالات رقیق
	۱-۲-۱ معادله دو پارامتری وان دروالس
۳۰	۱-۲-۲ معادله پینگ - رابینسون

۳۱	۲-۱-۳ معادله ردلیخ - واتگ
۳۱	۲-۱-۴ قاعده همدماهای خطی توسعه یافته ELIR
۳۲	۲-۲ معادلات حالت مربوط به سیالات چگال
۳۳	۲-۲-۱ معادله تیت
	۲-۲-۲ معادله مارناگان
۳۴	۲-۲-۳ معادله بوانزا
	۲-۲-۴ معادله حالت ایم-ساتگ-میسون (I.S.M)
۳۵	۲-۲-۵ قاعده همدماهای خطی LIR
۳۶	۲-۲-۶ معادله حالت عمومی برای سیالات چگال (DSEOS)
۳۷	۲-۳ معادلات حالت مربوط به دانسیته های متوسط و پایین
	۲-۳-۱ معادله حالت ویريال
۳۸	۲-۳-۲ ارتباط ضرایب دوم ویريال و پارامترهای وان دروالس
۴۰	۲-۴ معادله حالت عام برای سیالات
۴۱	۲-۵ آمار نظریه سیال تجمعی

فصل سوم : معادله حالت برای ناحیه فوق بحرانی

۴۳	۳-۱ رفتار خواص ترمودینامیکی در ناحیه فوق بحرانی
۵۵	۳-۲ محاسبه انرژی سیستم
۵۷	۳-۳ ارائه یک مدل پتانسیل مناسب برای منطقه فوق بحرانی
۵۸	۳-۴ محدوده کارایی مدل پتانسیل
۶۰	۳-۵ ارزیابی تجربی مدل انرژی داخلی و بررسی رفتار پارامترهای موجود در انرژی سیستم
۷۲	۳-۶ ارائه معادله حالت در ناحیه فوق بحرانی
	۳-۶-۱ (الف) محاسبه فشار از مکانیک آماری
۷۷	۳-۶-۲ (ب) معادله حالت با استفاده از p_{th} کره سخت
۷۹	۳-۷ ارزیابی تجربی معادله حالت
۸۲	۳-۸ بررسی تابعیت دمایی ضرایب معادله حالت ناحیه بحرانی
۸۵	۳-۹ تفسیر فیزیکی پارامتر n
	۳-۹-۱ (الف) پارامتر n و طول برهم کنش ξ
۸۶	۳-۹-۲ (ب) پارامتر n و طول دبای r_D

۱۰۵ فصل چهار: بحث و نتیجه گیری

مراجع

چکیده انگلیسی

- شکل ۱-۱: سطح $p-V-T$ برای سیستم تک جزئی [۱]. ۲
- شکل ۲-۱: همدماهای یک ترکیب نوعی نزدیک نقطه بحرانی [۲]. ۳
- شکل ۳-۱: تعیین نقطه بحرانی از اندازه گیری دانسیته مایع-بخار مطابق روش کایلین و ماتياس [۳]. ۴
- شکل ۴-۱: تغییرات گرمای تبخیر آب بر حسب تغییرات دما [۴]. ۶
- شکل ۵-۱: تغییر خواص ترمودینامیکی در انتقال فاز مرتبه اول [۷]. ۹
- شکل ۶-۱: تغییر خواص ترمودینامیکی در تبدیل فاز مرتبه دوم [۷]. ۱۰
- شکل ۷-۱: تبدیل فاز λ [۷]. ۱۰
- شکل ۸-۱: وابستگی مرزهای پایداری به پارامتر برهم کنش ϵ و n که عمق چاه پتانسیل و پارامتر هسته دافعه را به صورت $r^* = \epsilon n$ توصیف می کند (b) پتانسیل زوج نوعی که وابستگی آن به پارامترهای ϵ و n را نشان می دهد [۸]. ۱۱
- شکل ۹-۱: جنبه های بحرانی تصویر $p-p$ معادله حالت برای سیستم تک جزئی خالص [۸]. ۱۴
- شکل ۱۰-۱: توزیع بار خطی در یک مولکول. ۱۸
- شکل ۱۱-۱: برهم کنش دو توزیع بار خطی در مولکول [۱۱]. ۱۹
- شکل ۱۲-۱: فاکتور ساختار برای یک سیال فرضی با مولکولهای کروی بر حسب فاصله در دما و دانسیته ثابت (رفتار این تابع با تابع توزیع شعاعی مشابه است) [۸]. ۲۳
- شکل ۱۳-۱: نمودار فاز سیستم تک جزئی. ۲۵
- شکل ۱-۲: مدل پتانسیل وان دروالس. ۲۹
- شکل ۲-۲: مقایسه فاکتور تراکم پذیری تجربی متان در 500K (ρ) با مقدار محاسبه شده ELIR به صورت خط چین [۲۳]. ۲۲
- شکل ۳-۲: رفتار خطی بر اساس معادله تیت الف (جامدات ب) هیدروکربنها [۲۶]. ۲۳
- شکل ۴-۲: در منطقه هاشور نخورده $P-V$ معادله ویريال صادق است [۱۲]. ۲۸
- شکل ۱-۳: منحنی فشار - دانسیته سیال مونواکسید کربن برای همدمای 110K در ناحیه تبدیل فاز مرتبه اول [۳۹]. ۴۵
- شکل ۲-۳: منحنی انتروپی بر حسب دانسیته کاهش یافته برای همدمای 110K سیال مونوکسید کربن در ناحیه تبدیل فاز مرتبه اول [۳۹]. ۴۶
- شکل ۳-۳ الف): تغییرات انرژی گیس بر حسب دانسیته برای همدمای 110K و 230K و 600K به ترتیب برای ناحیه تبدیل فاز مرتبه اول ناحیه بحرانی و دور از ناحیه بحرانی مونوکسید کربن [۳۹]. ۴۷
- شکل ۳-۳ ب): تغییرات انتالپی بر حسب دانسیته برای همدمای 110K ناحیه تبدیل فاز مرتبه اول و 230K ناحیه بحرانی و 600K ناحیه دور از بحرانی [۳۹]. ۴۸
- شکل ۴-۳: مقایسه شیب منحنی انتروپی بر حسب دانسیته برای همدماهای 230K در ناحیه بحرانی و 600K دور از ناحیه بحرانی سیال مونواکسید کربن [۳۹]. ۴۹
- شکل ۵-۳: رفتار همدماهای مختلف فشار بر حسب دانسیته کاهش یافته در ناحیه فوق بحرانی از T_c تا $2T_c$ و دور از ناحیه بحرانی همدمای 600K مونوکسید کربن [۳۹]. ۵۰
- شکل ۶-۳: رفتار ظرفیت گرمایی ویژه بر حسب دانسیته در ناحیه بحرانی از T_c تا $2T_c$ برای سیال آرگون توجه شود که ماکزیمم ها با نزدیک شدن به $2T_c$ محو می شوند [۴۰]. ۵۱

- شکل ۷-۳ رفتار ضریب تراکم پذیری همدمای برای همدمای 150K و 170K و 220K و 270K سیال مونواکسید کربن به محو شدن ماکزیممها در $2T_c$ توجه شود [۳۹].
- شکل ۸-۳: تغییرات افت و حیز دانسیته در ناحیه بحرانی برای سیال مونواکسید کربن برای همدماهای از T_c تا $2T_c$ ($150-170-220-270$) کلوین [۳۹].
- شکل ۹-۳: بررسی سیال دی اکسید کربن حول و حوش ناحیه بحرانی الف (ظرفیت گرمایی درحجم ثابت ب) ظرفیت گرمایی در فشار ثابت ج) ضریب تراکم پذیری د) سرعت صوت [۲۱].
- شکل ۱۰-۳: محدوده کارایی مدل پتانسیل .
- شکل ۱۱-۳: وابستگی پارامتر n به دما برای سیال اتیلن [۴۲].
- شکل ۱۲-۳: مشابه شکل ۱۱-۳ برای سیال مونواکسید کربن [۳۹].
- شکل ۱۳-۳: مشابه شکل ۱۱-۳ برای سیال بنزن [۴۸].
- شکل ۱۴-۳: مشابه شکل ۱۱-۳ برای سیال متان [۴۳].
- شکل ۱۵-۳: مشابه شکل ۱۱-۳ برای سیال $R134a$ [۴۷].
- شکل ۱۶-۳: مشابه شکل ۱۱-۳ برای آرگون [۴۰].
- شکل ۱۷-۳: مشابه شکل ۱۱-۳ برای سیال $R32$ [۴۵].
- شکل ۱۸-۳: مشابه شکل ۱۱-۳ برای نیتروژن [۴۶].
- شکل ۱۹-۳: بررسی قانون حالت‌های متناظر برای پارامتر n سیالات مختلف برحسب دمای کاهش یافته
- شکل ۲۰-۳: انطباق پارامتر e_0 انرژی با معادله ۱۸-۳ برای سیال آرگون [۴۰].
- شکل ۲۱-۳: انطباق پارامتر e_n با معادله ۱۸-۳ برای سیال آرگون [۴۰].
- شکل ۲۲-۳: انطباق پارامتر e_4 با معادله ۱۸-۳ برای سیال آرگون [۴۰].
- شکل ۲۳-۳: مشابه شکل ۲۰-۳ برای سیال نیتروژن [۴۶].
- شکل ۲۴-۳: مشابه شکل ۲۱-۳ برای سیال نیتروژن [۴۶].
- شکل ۲۵-۳: مشابه شکل ۲۲-۳ برای سیال نیتروژن [۴۶].
- شکل ۲۶-۳: مقایسه فاکتور تراکم پذیری محاسبه شده از معادله عام (—) در مقایسه با مقادیر تجربی (O) برای سیال $R134a$ برای همدمای 275K [۴۷].
- شکل ۲۷-۳: تغییرات تابع $e_n n \rho^{n+1}$ برحسب دما وقتی که n تابعیت دمایی دارد (—) و زمانیکه n مقدار متوسط 0.185 (—) را اختیار میکند برای سیال آرگون [۴۰].
- شکل ۲۸-۳: تغییرات تابع $e_n n \rho^{n+1}$ برحسب دما وقتی که n تابعیت دمایی دارد (—) و زمانیکه n مقدار متوسط 0.185 (—) را اختیار میکند برای سیال آرگون [۴۰].
- شکل ۲۹-۳: تابع پتانسیل جفت کره سخت.
- شکل ۳۰-۳: تابع توزیع شعاعی برای کره سخت.
- شکل ۳۱-۳: مقایسه فاکتور تراکم پذیری تجربی (O) و محاسبه شده از معادله حالت ناحیه بحرانی (—) [۴۰].
- شکل ۳۲-۳: انطباق پارامتر a_2 معادله حالت با معادله ۴۰-۳ برای سیال نیتروژن [۴۶].
- شکل ۳۳-۳: شبیه شکل ۳۲-۳ برای a_n سیال نیتروژن [۴۶].
- شکل ۳۴-۳: شبیه شکل ۳۲-۳ برای a_4 سیال نیتروژن [۴۶].
- شکل ۳۵-۳: برد طول بر همکنش در نواحی بحرانی، دور از ناحیه بحرانی و زیر ناحیه بحرانی.
- شکل ۳۶-۳: تغییرات جمله جاذبه $e_n \rho^n$ برحسب طول برهم کنش برای سیال نیتروژن برای همدماهای $130, 140, 160, 220, 250$ کلوین [۴۶].

- شکل ۳-۳۷: وابستگی فاصله ای (a) پتانسیل کولنی در خلأ (b) پتانسیل کولنی در محیط با ضریب گذر دهی نسبی ۱/۵ و (c) پتانسیل کولنی پوششی با $\Gamma_D = 3$ [۷].
- شکل ۴-۱: توانایی معادلات حالت مختلف در پیش بینی فاکتور تراکم پذیری برای همدمای $T_r = 1/0.3$ داده های تجربی نیتروژن [۴۶].
- شکل ۴-۲: مشابه شکل ۴-۱ برای همدمای K ۱۹۰ یا $T_r = 1/5$ (توجه کنید که انحراف معادلات حالت از مقادیر تجربی کاهش یافته است.) [۴۶].
- شکل ۴-۳: مشابه شکل ۴-۱ برای همدمای K ۲۶۰ یا $T_r = 2/0.6$ (توجه کنید که انحراف معادلات حالت از مقادیر تجربی بسیار کوچک است.) [۴۶].
- شکل ۴-۴: توانایی معادله حالت ناحیه بحرانی (—) و معادله حالت عام (—) در پیش بینی فاکتور تراکم پذیری در مقایسه با مقادیر تجربی (o) برای همدمای K ۱۳۰ یا $T_r = 1/0.3$ سیال نیتروژن [۴۶].
- شکل ۴-۵: مشابه شکل ۴-۴ برای همدمای K ۱۹۰ یا $T_r = 1/5$ [۴۶].
- شکل ۴-۶: مشابه شکل ۴-۴ برای همدمای K ۲۶۰ یا $T_r = 2/0.6$ [۴۶].
- شکل ۴-۷: توانایی معادله حالت ناحیه بحرانی (—) و معادله حالت عام (—) در پیش بینی فاکتور تراکم پذیری در مقایسه با مقادیر تجربی (o) برای همدمای K ۳۷۵ یا $T_r = 1/0.3$ سیال R134a [۴۷].
- شکل ۴-۸: مشابه شکل ۴-۷ برای همدمای K ۴۲۰ یا $T_r = 1/1.2$ [۴۷].
- شکل ۴-۹: توانایی معادله حالت ناحیه بحرانی (—) و معادله حالت عام (—) در مقایسه با مقادیر تجربی (o) در پیش بینی ضریب تراکم پذیری همدمای K ۱۵۰ ($T_r = 1/1.3$) و K ۲۷۰ برای سیال مونواکسید کربن ($T_r = 2/0.3$) [۳۹].
- شکل ۴-۱۰: مقایسه ضریب انبساط پذیری هم فشار تجربی (o) و محاسبه شده از معادله حالت ناحیه بحرانی (—) برای سیال تولوئن $T_r = 1/0.4$ [۴۹].

۲۵	جدول ۱-۱: مقایسه خواص گاز مایع، SCF [۱۶].
۹۰	جدول ۱-۳: میزان انطباق انرژی داخلی سیال آرگون [۴۰] با معادله (۱۵-۳): الف) ۱۵۲K (ب) ۱۵۶ K (ج) ۱۶۰ K (د) ۱۷۰ K (ه) ۱۸۰ K (و) ۱۹۰ K (ز) ۲۰۰ K (ح) ۲۲۰ K (ط) ۲۵۰ K (ی) ۲۷۰ K.
۹۵	جدول ۲-۳: انطباق انرژی داخلی تجربی اتیلن [42] با عبارت انرژی، معادله (۱۵-۳) برای همدماهای داده شده، ضرایب و متوسط درصد خطای نسبی و ماکزیمم خطا.
۹۵	جدول ۳-۳: مشابه جدول ۲-۳ برای متان [43].
۹۶	جدول ۴-۳: مشابه جدول ۲-۳ برای دی اکسید کربن [44].
۹۶	جدول ۵-۳: مشابه جدول ۲-۳ برای مونوکسید کربن [39].
۹۷	جدول ۶-۳: مشابه جدول ۲-۳ برای میرد R ₃₂ [45].
۹۷	جدول ۷-۳: مشابه جدول ۲-۳ برای نیتروژن [46].
۹۸	جدول ۸-۳: مشابه جدول ۲-۳ برای میرد R ₁₃₄ [47].
۹۸	جدول ۹-۳: مشابه جدول ۲-۳ برای بنزن [48].
۹۹	جدول ۱۰-۳: ضرایب معادله حالت فوق بحرانی و متوسط درصد خطای فاکتور تراکم پذیری Z و ماکزیمم انحراف از داده های تجربی برای اتیلن [42].
۹۹	جدول ۱۱-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای CO ₂ [44].
۱۰۰	جدول ۱۲-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای نیتروژن [46].
۱۰۰	جدول ۱۳-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای بنزن [48].
۱۰۱	جدول ۱۴-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای آرگون [40].
۱۰۱	جدول ۱۵-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای اتان [50].
۱۰۲	جدول ۱۶-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای متان [43].
۱۰۲	جدول ۱۷-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای R134a [47].
۱۰۳	جدول ۱۸-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای R32 [45].
۱۰۳	جدول ۱۹-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای تولوئن [49].
۱۰۴	جدول ۲۰-۳: مشابه جدول ۱۰-۳ برای CO [39].

فهرست علائم

P	فشار
V	حجم
T	دما
ρ	دانسیته
T_c	دمای بحرانی
P_c	فشار بحرانی
ρ_c	دانسیته بحرانی
T_b	دمای بویل
ρ_b	دانسیته بویل
n	مول
κ_p	ضریب تراکم پذیری همفشار
κ_T	ضریب تراکم پذیری همدم
S	انتروپی
H	انتالپی
G	انرژی آزاد گیبس
H_{vap}	گرمای نهان تبخیر
k	ثابت بولتزمن
μ	پتانسیل شیمیایی
ε	عمق چاه پتانسیل
σ	قطر مولکول
κ_ε	ضریب تراکم پذیری ایزنتروپیک
C_v	ظرفیت گرمایی در حجم ثابت
C_p	ظرفیت گرمایی در فشار ثابت
ζ	طول بر همکنش
t	کشش سطحی
Q	تابع تقسیم
u	پتانسیل بر همکنش جفت
U_N	پتانسیل پیکر بندی سیستم
φ	پتانسیل بر همکنش جفت
Q	بار الکتریکی مولکول
μ	گشتاور دو قطبی
Θ	گشتاور چهار قطبی
Q	گشتاور صفرم
φ	پتانسیل الکتروستاتیکی مولکول
$g(r)$	تابع توزیع شعاعی
Z	انتگرال پیکر بندی
$h(r)$	تابع همبستگی کل
$C(r)$	تابع همبستگی مستقیم
SCF	سیال فوق بحرانی
v	سرعت ذره
x	مختصه ذره

X	نیروی ذره
P_{int}	فشار درونی
P_{ex}	فشار گرمایی
a	پارامتر جاذبه وان دروالس
b	پارامتر دافعه وان دروالس
ω	فاکتور شکل
LIR	قاعده همدمای خطی
ELIR	قاعده همدمای خطی توسعه یافته
DSEOS	معادله حالت سیالات چگال
B	ضریب کشیدگی
r	متوسط فاصله مولکولی
r	فاصله دو مولکول
$z(\rho)$	عدد کنور دیناسیون
SAFT	آمار نظریه تجمعی سیال
$G(r)$	تابع همبستگی کل
E	انرژی درونی سیستم
$\delta\rho$	افت و خیز دانسیته
$g(\sigma)$	تابع همبستگی کره سخت در نقطه تماس
ϵ_0	ضریب گذردهی خلأ
ϵ_r	ضریب گذردهی نسبی
Z	فاکتور تراکم پذیری
$B(T)$	ضریب دوم ویریال
$C(T)$	ضریب سوم ویریال
R	ثابت عمومی گازها
h	ثابت پلانک
N	تعداد مولکولها
N_A	عدد آووگادرو
U_d	انرژی الکتروستاتیکی
$w(r)$	انرژی پتانسیل نیروی متوسط