

صلى الله عليه وسلم



دانشگاه حکیم سیوری

معاونت آموزشی و تحصیلات تکمیلی
مدیریت تحصیلات تکمیلی

بسمه تعالی

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

با تلاوت آیاتی چند از کلام ا... مجید جلسه دفاع از پایان نامه خانم اسماء کیوانلو شهرستانکی دانشجوی رشته شیمی فیزیک با عنوان تعیین معادله تابع توزیع شعاعی سیالات شبه HFD و محاسبه اثرات کوانتومی و چند ذره ای در بعضی خواص ترمودینامیکی و حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیالات لنارد جونز و شبه HFD در ساعت 11 روز شنبه مورخ ۹۱/۶/۲۵ در محل دانشکده علوم پایه تشکیل گردید .

پس از استماع گزارش ارائه شده توسط دانشجو و استاد راهنما هیات داوران و حاضران سئوالاتی را مطرح و خانم اسماء کیوانلو شهرستانکی به دفاع از موضوع پرداخت و به سئوالات آنها پاسخ گفت .

سپس پایان نامه توسط هیات داوران مورد ارزشیابی قرار گرفت و نمره ۱۹ برابر درجه عالی برای آن تعیین گردید . به این ترتیب ضمن تصویب پایان نامه مزبور از این تاریخ خانم اسماء کیوانلو شهرستانکی به عنوان کارشناس ارشد در رشته شیمی فیزیک شناخته می شود .

ردیف	نام و نام خانوادگی	سمت	امضا
	دکتر محسن عباس پور	استاد راهنما	
	دکتر سیروس سالمی	استاد مشاور	
	دکتر حامد اکبرزاده	استاد داور	
	دکتر بهروز ملکی	نماینده تحصیلات تکمیلی	

نام و نام

خانوادگی و امضای مدیر گروه

دکتر اسماعیل رضایی سرشت

رونوشت

- ۱- معاونت آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشگاه جهت اطلاع
- ۲- معاونت پژوهشی دانشگاه جهت اطلاع
- ۳- آموزش دانشکده جهت درج در پرونده دانشجو



دانشگاه حکیم سبزواری

معاونت آموزشی و تحصیلات تکمیلی
مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم ۱۱۶ - ت

سوگند نامه دانش آموختگان دانشگاه تربیت معلم سبزواری

به نام خداوند جان و خرد
کزین برتر اندیشه بر نگذرد

اینک که به خواست آفریدگار پاک، کوشش خویش و بهره گیری از دانش استادان و سرمایه های مادی و معنوی این مرز و بوم، توشه ای از دانش و خرد گردآورده ام، در پیشگاه خداوند بزرگ سوگند یاد می کنم که در به کارگیری دانش خویش، همواره بر راه راست و درست گام بردارم. خداوند بزرگ، شما شاهدان، دانشجویان و دیگر حاضران را به عنوان داورانی امین گواه می گیرم که از همه دانش و توان خود برای گسترش مرزهای دانش بهره گیرم و از هیچ کوششی برای تبدیل جهان به جایی بهتر برای زیستن، دریغ نورزم. پیمان می بندم که همواره کرامت انسانی را در نظر داشته باشم و ممنوعان خود را در هر زمان و مکان تا سر حد امکان یاری دهم. سوگند می خورم که در به کارگیری دانش خویش به کاری که با راه و رسم انسانی، آیین پرهیزگاری، شرافت و اصول اخلاقی برخاسته از ادیان بزرگ الهی، به ویژه دین مبین اسلام، مبادینت دارد دست نیازم. همچنین در سایه اصول جهان شمول انسانی و اسلامی، پیمان می بندم از هیچ کوششی برای آبادانی و سرافرازی میهن و هم میهنانم فروگذاری نکنم و خداوند بزرگ را به یاری طلبم تا همواره در پیشگاه او و در برابر وجدان بیدار خویش و ملت سرافراز، بر این پیمان تا ابد استوار بمانم.

نام و نام خانوادگی وامضای دانشجو



دانشگاه حکیم سبزواری

دانشکده علوم پایه

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

و محاسبه اثرات کوانتومی و چند ذره ای در بعضی خواص HFD تعیین معادله تابع توزیع شعاعی سیالات شبه

HFD ترمودینامیکی و حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیالات نئارد جونز و شبه

استاد راهنما :

دکتر محسن عباس پور

استاد مشاور:

دکتر سیروس سالمی

نگارش :

شهریور ۱۳۹۱

قدردانی

در پایان خدا را شاکرم که توفیق گام برداشتن در مسیر علم به ویژه طریق عرفان و راه رسیدن به خود را برایم فراهم آورد.

وظیفه خود میدانم که از اساتید و بزرگان و سروران گرامی که در مدت تحصیل با لطف و محبت و تلاش علمی به نگارنده توفیق استفاده از محضر علمی خود را داده اند تشکر و قدر دانی بنمایم به خصوص از استاد گرامی ام جناب آقای دکتر محسن عباس پور استاد راهنمای این رساله که با دقت و پیگیرانه در امر تحقیق راهنمایی های شایان توجهی نموده اند و از خداوند متعال برایشان سلامتی و آرزوی توفیق دارم.

همچنین از پدر و مادر و همسر م که گرمای وجودشان و حمایت های همواره آنان آرام بخش لحظاتم در نگارش این پژوهش بود صمیمانه سپاس گزارم و امیدوارم حاصل این پژوهش پاسخ ناچیزی در برابر زحمات فراوان آنان در طول سالهای زندگی ام باشد.



دانشگاه حکیم سزوار

فرم چکیده‌ی پایان‌نامه‌ی دوره‌ی تحصیلات تکمیلی

دفتر مدیریت تحصیلات تکمیلی

نام: اسماء	نام خانوادگی دانشجو: کیوانلو	ش دانشجویی: ۸۹۱۱۰۴۰
استاد مشاور: دکتر سالمی	استاد راهنما: دکتر عباسپور	
دانشکده: علوم پایه	رشته: شیمی	گرایش: شیمی فیزیک
مقطع: کارشناسی ارشد	تاریخ دفاع: 91/6/25	تعداد صفحات:
عنوان پایان‌نامه: تعیین معادله تابع توزیع شعاعی سیالات شبه HFD و محاسبه اثرات کوانتومی و چند ذره ای در بعضی خواص ترمودینامیکی و حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیالات لنارد جونز و شبه HFD		
واژه‌های کلیدی: تابع توزیع شعاعی, همبستگی کوانتومی, برهم کنشهای چند ذره ای		

چکیده

شبه سازی مولکول دینامیکی برای ارائه یک بیان دقیق معادله تابع توزیع شعاعی سیالات شبه HFD در گستره دمایی و رنجهای $5.1 \ll T^* \ll 0.5$ و $1.1 \ll \rho^* \ll 0.35$ به کار رفته است. همچنین فشار، انرژی داخلی و حد فرکانس بالای کشیدگی برشی با استفاده از فرمولهای مکانیک آماری با پتانسیلهای دو ذره ای شبه HFD و LJ برای اتم آرگون و نئون به ترتیب محاسبه شده است. اصلاحات کوانتومی برای سیستم لنارد جونز با استفاده از روش فاینمن- هیبس (FH) و ویگنر- کرک وود (WK) انجام شده است. همچنین در محاسبات سیستمهای شبه HFD نیروهای چند ذره ای نیز در نظر گرفته شده، پتانسیل های سه ذره ای گیوزمن و همکارانش (۲۰۱۱) ، وانگ و سادوس (۲۰۰۶) ، و هاوسچایلد و پراسنیتز (۱۹۹۳) به همراه پتانسیل دو ذره ای بدون نیاز به محاسبات پیچیده ی سه ذره ای مورد استفاده قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که اثرات کوانتومی و سه ذره ای پیش بینی فشار و انرژی داخلی سیالات LJ و شبه HFD را بهبود می بخشند.

امضای استاد راهنما

فهرست مطالب

صفحه	فهرست
VI	فهرست جداول
VII	فهرست شکلها
۱	فصل اول: مقدمه
۱-۱	۱-۱ تابع توزیع شعاعی
۳	۲-۱ تابع توزیع شعاعی جامد و مایع و گاز
۳	۱-۲-۱ تابع توزیع شعاعی گاز
۴	۱-۲-۲ تابع توزیع شعاعی جامد
۵	۱-۲-۳ تابع توزیع شعاعی مایع
۶	۳-۱ اهمیت تابع توزیع شعاعی
۷	۴-۱ پارامترهای تابع توزیع شعاعی
۸	۵-۱ هدف این کار

فصل دوم : بررسی متون در زمینه تابع توزیع شعاعی مولکولی برای سیالات شبه HFD و

- ۹..... LJ
- فصل سوم : تئوری تابع توزیع شعاعی سیالات ۱۲
- ۱-۳-۱-۳ توابع توزیع در سیالات تک اتمی 12
- ۱-۱-۳-۱ فرمول بندی تابع توزیع شعاعی ۱۲
- ۱-۱-۳-۲ تابع توزیع شعاعی یک سیال ۱۴
- ۲-۳-۲ اهمیت RDF ۱۶
- ۳-۳-۳ روابط توابع ترمودینامیکی با RDF ۱۷
- ۱-۳-۳-۱ انرژی ۱۷
- ۲-۳-۳-۲ فشار ۱۸
- ۳-۳-۳-۳ تراکم پذیری ۱۸
- ۴-۳-۴ خواص مکانیکی ۱۹
- ۵-۳-۵ روشهای مختلف تعیین RDF ۲۰
- ۱-۵-۳-۱ تئوری معادله انتگرالی ۲۰
- ۱-۱-۵-۳-۱ معادله انتگرال کرک وود ۲۰
- ۲-۱-۵-۳-۲ معادله انتگرال بورن-گرین-یون ۲۲

۲۳ معادله انتگرال اورنشتاین-زرنیگ
۲۵ شبیه سازی مولکول دینامیکی
۲۷ مراحل شبیه سازی مولکول دینامیکی
۲۷ معادله حرکت
۲۸ شرایط مرزی تناوبی
۲۹ انساملهای شبیه سازی مولکول دینامیکی
۳۰ محاسبه خواص ترمودینامیکی به کمک شبیه سازی مولکول دینامیکی
۳۲ روشهای تجربی
۳۴ معادلات $g(r)$ پیشنهاد شده برای سیالات شبه HFD و LJ
۳۴ عبارت متغولی و منصوره
۳۵ عبارت مرسله و همکارانش
۳۵ عبارت گوهرشادی و عباسپور
۳۶ فصل چهارم: نتایج و بحث
۳۶ ۱-نتایج
۳۶ ۲-سیستم ارگون
۳۶ ۱-۲-پتانسیل بین مولکولی ارگون
۴۰ ۲-۲-RDF ارگون

۴-۳	جزئیات شبیه سازی	۴۱
۴-۴	نتایج و بحث ارگون	۴۱
۴-۵	سیستم نئون	۴۴
۴-۵-۱	پتانسیل بین مولکولی نئون	۴۴
۴-۵-۲	RDF نئون	۴۶
۴-۶	نتایج و بحث نئون	۴۷
۴-۷	نتیجه گیری	۴۹

فهرست جداول

صفحه	جدول
۵۱	جدول (۱-۴) پارامترهای پتانسیل ارگون و نئون استفاده شده در این تحقیق
۵۲	جدول (۲-۴) مقادیر پارامترهای معادلات (۱۶-۴) و (۱۷-۴)

فهرست شکل

شکل	صفحه
شکل (۱-۱) شماتیک فضایی از ذرات برای تخمین تابع توزیع شعاعی	۲
شکل (۲-۱) تابع توزیع شعاعی گاز	۳
شکل (۳-۱) تابع توزیع شعاعی جامد	۴
شکل (۴-۱) تابع توزیع شعاعی مایع	۵
شکل (۱-۳) تابع توزیع شعاعی	۱۵
شکل (۲-۳) تابع همبستگی کل و تابع همبستگی مستقیم	۲۴
شکل (۳-۳) $c(r)$ و $h(r)$ برای یک سیال	۲۵
شکل (۴-۳) سل مکعبی با شرایط مرزی تناوبی	۲۹
شکل (۵-۳) اندازه گیری RDF	۳۳
شکل (۱-۴) مقایسه بین RDF های محاسبه شده سیال ارگون با استفاده از معادلات (۱۶-۴) و	
(۱۷-۴) با شبیه سازی MD و مقادیر تجربی	۶۷
شکل (۲-۴) مقایسه بین فشار های کاهش یافته محاسبه شده سیال ارگون با استفاده از	

پتانسیلهای مختلف با مقادیر تجربی ۶۸

شکل (۳-۴) مقایسه بین انرژی های کاهش یافته محاسبه شده سیال ارگون با استفاده از

پتانسیلهای مختلف با مقادیر تجربی ۶۹

شکل (۴-۴) مقادیر محاسبه شده حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیال ارگون با استفاده

از پتانسیلهای مختلف ۷۰

شکل (۵-۴) مقایسه بین فشار های کاهش یافته محاسبه شده سیال نئون با استفاده از پتانسیلهای

مختلف با مقادیر تجربی ۷۱

شکل (۶-۴) مقایسه بین انرژی های کاهش یافته محاسبه شده سیال نئون با استفاده از پتانسیلهای

مختلف با مقادیر تجربی ۷۲

شکل (۷-۴) مقایسه بین حد فرکانس بالای کشیدگی برشی کاهش یافته محاسبه شده سیال نئون

با استفاده از پتانسیلهای مختلف با مقادیر مقالات ۷۳

شکل (۸-۴) مقایسه بین نتایج کاهش یافته محاسبه شده سیال نئون بر روی منحنی تعادل مایع- بخار

با استفاده از پتانسیلهای مختلف با مقادیر مقالات ۷۴

فصل اول

مقدمه

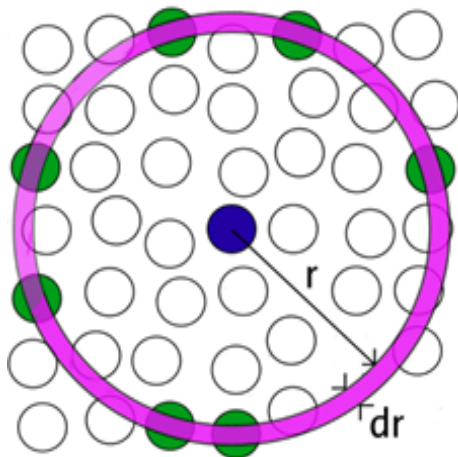
۱-۱ تابع توزیع شعاعی^۱ (RDF)

تعیین ساختار مواد بسیار مهم است زیرا اثری مستقیم بر روی رفتار مواد دارد. طراحان در حال تلاش برای توسعه ابزارهایی هستند که در پیش بینی خواص مواد موثر باشند و اغلب توانایی نمونه هایشان را در ثبت اشکال ساختاری امتحان می کنند. اگر در سطح مولکولی موفق به توصیف و بیان این رفتار به طور اصولی شوند احتمالاً نمونه هایشان خیلی بیشتر قادر به توصیف انواع مختلفی از رفتار مواد در بازه وسیعی از شرایط می باشد. راه های ممکن زیادی برای تعیین کمی ساختار مواد وجود دارد که تابع توزیع شعاعی یکی از این راه ها می باشد. برای درک کامل حالت مایع مواد درک رفتار سطوح مولکولی لازم می باشد. چنین رفتاری توسط دو کمیت به نام های تابع پتانسیل بین مولکولی جفتی^۲ $u(r)$ و تابع توزیع شعاعی $g(r)$ و (RDF) مشخص می شود. پتانسیل جفتی اطلاعاتی در مورد انرژی ناشی از برهم کنش یک جفت مولکول می دهد و خود تابعی از فاصله بین مراکز مولکولهاست. اطلاعات مربوط به ساختمان یا فواصل بین جفت مولکولها توسط تابع توزیع شعاعی تعیین می شود RDF معمولاً به صورت تابعی از فاصله بین ذره ای و

¹ Radial distribution function(RDF)

² Pair potential function

درجه حرارت و دانسیته $(g(r, t, \rho))$ نشان داده می شود که [۱] روشی برای محاسبه احتمال پیدا کردن ذراتی که به صورت کروی در لایه dr در اطراف اتم مرکزی در فاصله r قرار گرفته اند میباشد.



شکل (۱-۱) شماتیک فضایی از ذرات برای تخمین تابع توزیع شعاعی

تابع توزیع شعاعی (RDF) به مانند یک پل ارتباطی عمل می کند، برای ارتباط خواص ترمودینامیک ماکروسکوپی مواد با برهم کنشهای بین مولکولی^۱، میتوان گفت تابع توزیع شعاعی یک کمیت کلیدی در علم مکانیک آماری می باشد، زیرا چگونگی وابستگی ذرات با هم را نشان می دهد و مشخص می کند این وابستگی ها با افزایش فاصله کاهش می یابد. [1]

تابع توزیع شعاعی یکی از خواص ساختاری است که نشان دهنده نظم موضعی است و به صورت زیر

تعریف می شود: $g(r) = \frac{\rho(r)}{\rho}$ ، که $g(r)$ به عنوان فاکتوری می باشد که در چگالی توده ρ ضرب می شود تا

چگالی موضعی $\rho(r)$ حول یک مولکول را تولید کند. محدوده رفتار $g(r)$ به صورت زیر است:

¹ Intermolecular interaction

اگر $r \longrightarrow 0$ در اینصورت $g(r) \longrightarrow 0$

اگر $r \longrightarrow \infty$ در اینصورت $g(r) \longrightarrow 1$

2-1 تابع توزیع شعاعی جامد، مایع و گاز

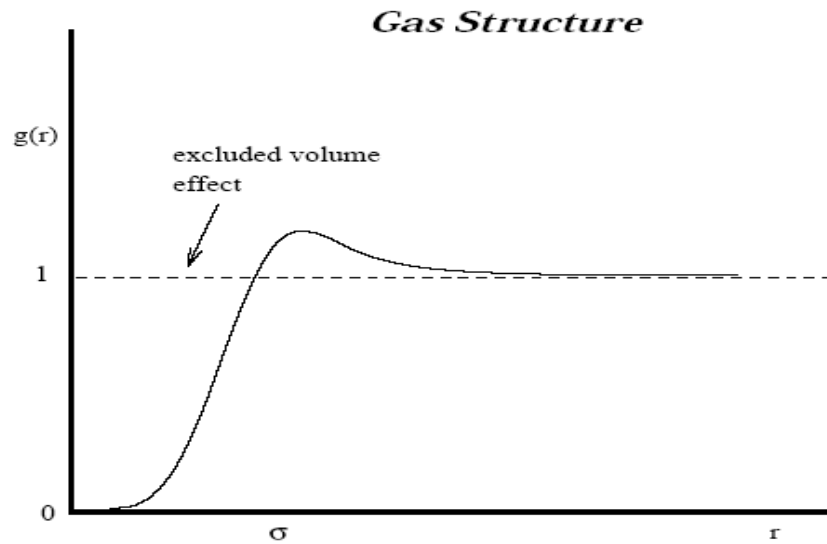
۱-۲-۱ تابع توزیع شعاعی گاز

$g(r)$ همان تابع توزیع شعاعی یا تابع همبستگی جفتی^۱ است که علاوه بر فاصله به دما و دانسیته

نیز وابسته است. برای سیستمهای بدون برهم کنش $g(r)=1$ که این به این خاطر است که در غیاب نیروهای بین مولکولی هر مولکول بطور مستقل در حضور سایر مولکولها در سرتاسر حجم کل حرکت و جنبش دارند. در یک گاز ایده ال نیروهای بین مولکولی وجود ندارد و حجم مولکولها ناچیز است و $g(r)$ پیوسته است و احتمال دستیابی به مولکول دوم که به طور تصادفی در اطراف مولکول مرکزی حرکت میکنند مستقل از موقعیت است به طور کلی برای گازها همبستگی ساختاری خیلی کم است به همین دلیل

¹ Pair correlation function($g(r)$)

تابع توزیع شعاعی برای گازها به صورت زیر است:



شکل (۲-۱) تابع توزیع شعاعی یک گاز

۲-۲-۱ تابع توزیع شعاعی جامد کریستالی

تابع توزیع شعاعی برای سیستمهایی که دارای برهم کنش هستند متفاوت است. در جامدات مولکولها

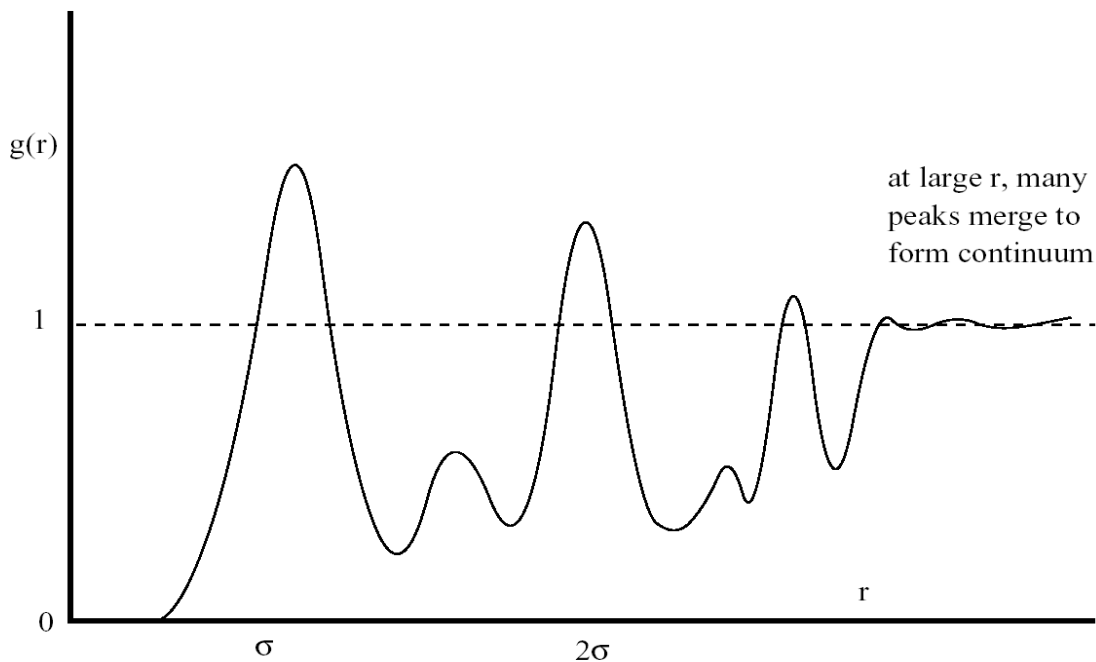
به صورت منظم هستند و تابع توزیع شعاعی دارای یک ناپیوستگی در فاصله ای برابر با موقعیت وابسته به

ساختار جامدات کریستالی است. تابع توزیع شعاعی دارای تعداد زیادی پیک است، جاییکه پیکها جدا میشوند

و ارتفاع میگیرند مشخصه ای از ساختار مشبک آنهاست. برای جامدات در دامنه های بزرگ نظم هست و تابع

توزیع شعاعی برای آنها به صورت زیر است:

Crystal Structure

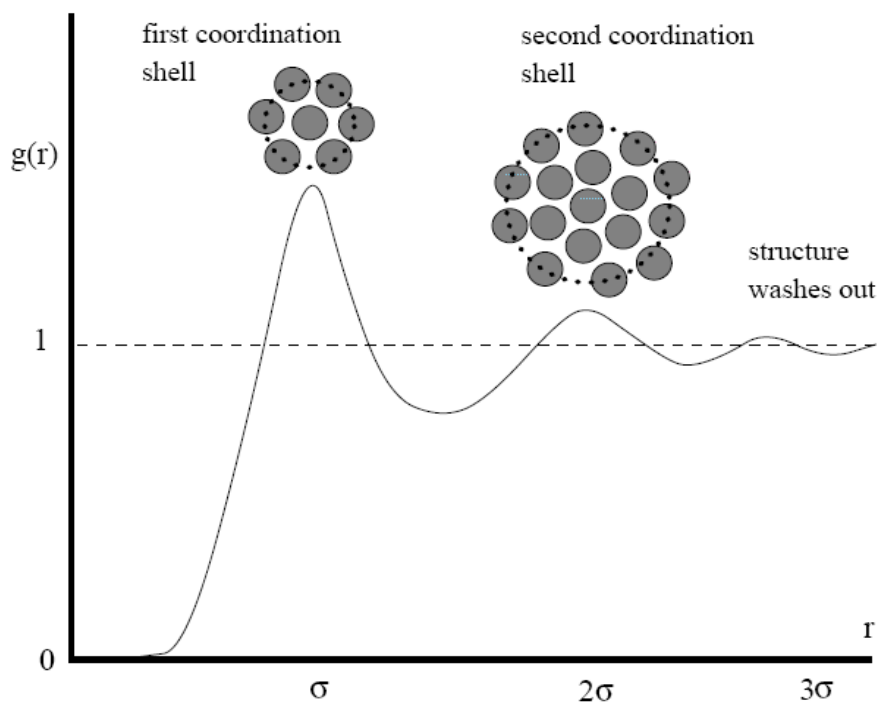


شکل (۳-۱) تابع توزیع شعاعی یک جامد کریستالی

۳-۲-۱ تابع توزیع شعاعی مایع

مایعات نه مثل جامدات ساختاری منظم و نه مثل گازها ساختاری کاملاً تصادفی دارند مولکولها در یک مایع ازادانه حرکت میکنند اما در آنها مقداری نظم هست زیرا در نزدیکی هم باقی میمانند برای مایعات تابع توزیع شعاعی متوسطی بین جامد و گاز است ، با تعداد اندکی از پیکها در فواصل کوتاه، برای مایعات در دامنه های کوچک نظم هست. حرکت یک مولکول در یک جسم سیال به محل مولکول های همسایه اش بستگی دارد. چنین ارتباطی منجر به یک نظم موضعی و کم دامنه می گردد، این نظم مسئول اکثر خواص سیالات می باشد. و تابع توزیع شعاعی به صورت زیر است:

Liquid Structure



شکل (۱-۴) تابع توزیع شعاعی یک مایع

۱-۳ اهمیت تابع توزیع شعاعی

به چندین دلیل مختلف اطلاع و دانش درباره RDF مهم می باشد :

- مهمترین دلیل اینکه ، دانش RDF اطلاعات کافی برای محاسبه خواص ترمودینامیکی خصوصا قابلیت تراکم پذیری هم دما^۱ را در اختیار ما می گذارد. آگاهی از این اطلاعات برای محاسبه انرژی داخلی و فشار کافی می باشد حتی اگر برهم کنشهای جفتی^۲ داشته باشیم. [۳-۵]

^۱ isothermal

^۲ Pairwise additivity

- ثانياً ، اطلاعات درباره RDF به ما اجازه محاسبه مستقیم پیوستگی انتگرالهای تابعی که پایه نظریه نوسان ترکیبات می باشد را خواهد داد. [6]
- ثالثاً ، RDF بهترین ویژگی طبیعت مواد است ، مخصوصاً مایعات ، و دانش درباره آنها می تواند صفات اختصاصی سیالات و ترکیبات سیال را آشکار نماید. [۱]

۴-۱ پارامترهای تابع توزیع شعاعی

از آنجائیکه اطلاعات در مورد تابع توزیع شعاعی تنها به مقالاتی [7] که در طول شبیه سازی مولکولی دینامیکی به دست آمده محدود می شود و خیلی کم در دسترس اند از این رو در بیانی ساده به عنوان تابعی از

$$\rho^* = \rho \sigma^3, T^* = \frac{k_b T}{\epsilon} \text{ و } r^* = \frac{r}{\sigma} \text{ که } r^* \text{ فاصله بین ذره ای کاهش یافته و } \rho^* \text{ چگالی کاهش یافته و}$$

T^* دمای کاهش یافته بوده و بقیه پارامترها به ترتیب زیر تعریف می شوند:

k_b : ثابت بولتزمن

ρ : دانسیته

ϵ : عمق چاه پتانسیل بین مولکولی (پارامتر انرژی)

r : فاصله بین ذرات

T : دما

σ : فاصله ای که در آن پتانسیل بین مولکولی صفر می شود (پارامتر طول)

۱-۵ هدف این کار

لفظ گازهای نجیب که بی رنگ و بی بو هستند به عناصر گروه ۸ جدول تناوبی مربوط می شود که همه در دمای اتاق گازی هستند و با وجود ساختار الکترونی ساده و لایه ظرفیت کامل آنها برهمکنشهای آنها همواره به عنوان یک سوال مطرح بوده است و هرگز به طور کامل حل نشده است.

در این کار دو اتم نئون و آرگون از گازهای نجیب مورد تحقیق قرار گرفته اند و تاثیرات کوانتومی و چند ذره ای در محاسبات فشار و انرژی داخلی با استفاده از فرمولهای مکانیک اماری به همراه پتانسیلهای شبه

HFD 'دو ذره ای و لنارد جونز به ترتیب برای ارگون و نئون مورد بررسی قرار گرفته اند. RDF های مورد نیاز در نوشته ها از دو عبارت دقیق تعیین شده اخیر مورد استفاده قرار گرفته است .

شبیه سازی مولکول دینامیکی برای ایجاد عبارتی برای RDF سیالات شبه HFD درگستره ای از دما و چگالی های مختلف به کار برده شده است. تصحیحات کوانتومی برای سیستم نئون با استفاده از روشهای FH و WK مورد بررسی قرار گرفته است. پتانسیلهای سه ذره ای ساده هاوسچایلد و پراسنیتز^۲ [8], وانگ و سادوس^۳ [9] و گیوزمن^۴ و همکارانش [10] به همراه پتانسیل دو ذره ای ارگون بدون نیاز به محاسبات سه ذره ای پیچیده مورد استفاده قرار گرفت.

برای اولین بار تصحیحات کوانتومی و چند ذره ای در محاسبه حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیالات لنارد جونز و شبه HFD مورد بررسی قرار گرفته است.

فصل دوم

بررسی متون در زمینه تابع توزیع شعاعی برای سیالات LJ و HFD

تابع توزیع شعاعی RDF یا تابع همبستگی جفتی $g(r)$ یک کمیت کلیدی مهم است زیرا احتمال یافتن مولکول دوم در اطراف مولکول مرکزی که به عنوان اتم مرجع در نظر گرفته می شود در فاصله r از آن مشخص

¹ Hartree-Fock dispersion potential

² Hauschild and Prausnitz

³ Wang and Sadus

⁴ Guzman

می کند. این تابع به صورت تابعی وابسته به درجه حرارت، دانسیته و فاصله بین مولکولی کاهش یافته نشان داده می شود. مقالاتی که برای این موضوع کار شده اند بسیار محدود اند.

در سال ۱۹۷۹ گلدمن^۱ یک فرم ریاضی در گستره $0.5 \leq T^* \leq 5.0$ و $0.35 \leq \rho^* \leq 1.10$ برای RDF پیشنهاد کرد و نشان داد شکل RDF خیلی با تغییر دما، دانسیته و فاصله بین مولکولی تغییر می کند که برای توضیح رفتار RDF نیاز به پارامترهای تنظیم پذیر دارد. پارامترهایی که در این توابع بکار رفته بسیار زیاد و نامشخص اند به همین خاطر توابعی که پیشنهاد شده بسیار پیچیده و نامشخص است به همین دلیل شکل‌های زیادی از RDF دوباره ایجاد شده و پیشگویی‌های دقیقی از فشار صورت گرفت. گلدمن^۲ ۹۶ پارامتر تنظیم پذیر را بیان کرد که به وسیله فیت کردن سه متغیر تابع با استفاده از داده‌های مولکول دینامیکی^۳ برای RDF در سیالات لنارد جونز به دست آمد. [11]

در سال ۱۹۹۵ متئولی^۴ و منصوره^۵ مناسبترین ارائه‌ای که بتواند RDF را در یک نقطه به جز مبدا پیش-بینی کند را در یک اصطلاح ریاضی برای RDF مبنی بر شبیه سازی ورلت^۵ مطرح کردند. آنها داده‌های ورلت را در یک روش ریاضی با ۲۱ پارامتر تنظیم پذیر فیت کردند و بهترین تست را به وسیله محاسبه انحراف ریشه مربع میانگین یا انحراف استاندارد بین RDF شبیه سازی شده و RDF فیت شده انجام دادند و نشان دادند این

¹ Goldman

² Molecular dynamics(MD)

³ Matteoli

⁴ Mansoori

⁵ Verlet simulation

تست برای تحقیق از بهترین فیت برای کمیتها ی ترمودینامیکی کافی نیست زیرا اختلافات کوچک بین RDF

شبیه سازی شده و RDF فیت شده وقتی فشار را محاسبه می کنیم ایجاد اختلافهای بزرگ می کند. [۱۲]

در سال ۲۰۰۵ مرسلی^۱ و همکارانش یک الگو دقیق و ساده برای تابع توزیع شعاعی لنارد-جونز ارائه دادند این عبارت به طور واضح RDF را به عنوان یک تابع پیوسته برای فاصله کاهش یافته بین ذره ای,درجه حرارت و دانسیته نشان می دهد. این تابع شرایط به صفر رساندن دانسیته و فاصله نامحدود تحمیل شده توسط ترمودینامیک اماری را جبران می کند. آنها یک معادله شامل ۱۱ پارامتر را ارائه دادند که این پارامترها متناسب با ۳۵۳ داده بود که این داده ها را به کمک محاسبات MD به دست آورده بودند. سپس آنها را به عنوان تابعی از فاصله کاهش یافته بین ذره ای,درجه حرارت و دانسیته ارائه دادند. این الگو ۶۵ پارامتر تنظیم پذیر داشت و داده های RDF را با میانگین انحراف معیار ۰,۰۱۵۲ در گستره

۵,۱ $\ll T^* \ll 0.5$ و $0.35 \ll \rho^* \ll 1.10$ باز تولید می کرد. آنها سپس انرژی درونی و فشار سیال LJ

قابل مقایسه با نتایج حاصل از شبیه سازی MD را محاسبه کردند. [۱]

در ۲۰۰۶ عباسپور^۲ و گوهرشادی^۳ یک پتانسیل برای کشش سطحی کاهش یافته در سیالات شبه HFD ارائه دادند که این پتانسیل از وارونه سازی انتگرال برخورد در فشار صفر به دست می آمد. آنها برای محاسبه مقادیر RDF مورد نیاز برای محاسبه کشش سطحی از شبیه سازی MD در دماها و چگالی های مختلف

¹ Morsali

² Abbaspour

³ Goharshadi

استفاده کردند و سپس آنها را با یک معادله مناسب فیت کردند و نتایج RDF را با مقادیر تجربی مقایسه کردند و بیان کردند این نتایج مطابقت خوبی با تجربه دارد. [۱۸]

در سال ۲۰۰۶ بامداد^۱ و همکارانش شبیه سازی MD را برای ارائه یک الگو مناسب برای تابع توزیع شعاعی سیال L-J برای ۱۶۵ دمای کاهش یافته در دامنه ای از $4,2 \ll T^* \ll 1$ و $0,85 \ll \rho^* \ll 0,35$ به کار بردند. آنها نشان دادند که فشار خیلی حساس به تغییر شکل RDF است و به عنوان یک معیار مناسب دقت RDF شبیه سازی شده استفاده می شود. پارامترهایی که استفاده می کردند تنظیم پذیر بود و بنابراین به طور دقیق فشار را برای سیال L-J با یک انحراف استاندارد حدود ۱,۶٪ محاسبه می کردند و آنها همچنین تابع G_{∞}^* را برای سیال LJ محاسبه کردند و یک معادله ساده برای تابع G_{∞}^* سیال L-J در فاصله

$4,2 \ll T^* \ll 1$ و $0,85 \ll \rho^* \ll 0,35$ ارائه دادند. [2]

فصل سوم

تئوری تابع توزیع شعاعی

3-۱ توابع توزیع در سیالات تک اتمی

¹ Bamdad

تئوری های جدید سیالات و مخلوط آن ها به میزان زیادی از مفهوم RDF بهره گرفته اند. تئوری های RDF در توصیف رفتار مایعات ساده و مخلوط های آن ها کاملاً موفق بوده است [۳]. RDF به طور کمی، ساختار مایع را بر حسب احتمال یافتن ذره در فاصله مشخصی از ذره مرکزی در توزیع یکنواختی از ذرات را بیان می کند. وقتی RDF در مورد اتم های یک سیستم مولکولی بکار برده می شود شکل بسیار پیچیده ای دارد. برای درک این موارد پیچیده ابتدا لازم است $g(r)$ را برای سیالات ساده توصیف شود. [13]

1-1-3 فرمول بندی تابع توزیع

سیستمی با N ذره در حجم V و دمای T در نظر بگیرید. احتمال اینکه مولکول ۱ در r_1 و در dr_1 مولکول

۲ در r_2 و در dr_2 و ... باشد به صورت زیر است [۳] :

$$P^{(N)}(r_1, \dots, r_N) dr_1 \dots dr_N = \frac{e^{-\beta U_N} dr_1 \dots dr_N}{Z_N} \quad (1-3)$$

در این معادله $\beta = 1/kT$ (k ثابت بولتزمن است) و Z_N انتگرال پیکربندی می باشد.

$$Z_N = \int \dots \int e^{-\beta U_N} dr_1 \dots dr_N \quad (2-3)$$

احتمال این که مولکول ۱ در r_1 و در dr_1 و ... و مولکول n در r_n و در dr_n باشد، صرف نظر از

پیکربندی بقیه ی $N-n$ مولکول با انتگرال گیری از معادله ی (۱-۳) روی مختصات $(n+1)$ مولکول از N مولکول بدست می آید:

$$P^{(n)}(r_1, \dots, r_n) dr_1 \dots dr_n = \frac{e^{-\beta U_N} dr_{n+1} \dots dr_N}{Z_N} \quad (3-۳)$$

این رابطه به دلیل N انتخاب برای مولکول اول، $(N-1)$ برای مولکول دوم و ... به وجود می آید.

احتمال این که هر مولکول در Γ_1 و در $d\Gamma_1$ و \dots و هر مولکول n در Γ_n و در $d\Gamma_n$ باشد، صرف نظر از

پیکربندی بقیه ی مولکول ها به صورت زیر است:

$$\rho^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{N!}{(N-n)!} P^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \quad (4-3)$$

ساده ترین تابع توزیع $\rho^1(\Gamma_1)$ می باشد. تابع توزیع شعاعی یک بلور تناوبی از Γ_1 با ماکزیمم تیزی در

مکان های شبکه می باشد، اما در یک سیال تمام نقاط موجود در حجم V معادل هستند و بنابراین $\rho^1(\Gamma_1)$

مستقل از Γ_1 می باشد. بنابراین برای یک سیال می توان نوشت:

$$\frac{1}{V} \int \rho^{(1)}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 = \rho^{(1)} = \frac{N}{V} = \rho \quad (5-3)$$

در این معادله از معادلات (1-3) تا (4-3) برای برابری انتگرال $\rho^1(\Gamma_1)$ با N استفاده شده است. تابع

همبستگی $g^n(\Gamma_1, \dots, \Gamma_n)$ به صورت زیر تعریف می شود:

$$\rho^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \rho^{(n)} g^n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \quad (6-3)$$

g^n تابع همبستگی می باشد زیرا اگر مولکول ها مستقل از یکدیگر باشند $\rho^{(n)}$ به سادگی با ρ^n برابر بوده و

در نتیجه فاکتور $g^{(n)}$ در معادله ی (6-3) تصحیحی برای وابسته نبودن یا همبستگی بین مولکول ها می باشد.

1-1-3 تابع توزیع شعاعی سیال

تابع $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ اهمیت زیادی دارد از آنجایی که به طور تجربی تعیین می شود. در یک مایع با مولکول

های متقارن کروی، $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ تنها به فاصله ی نسبی بین مولکول های ۱ و ۲ یعنی r_{12} بستگی دارد. در ادامه،

r_{12} را به سادگی با r و $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ را با $g(r)$ نشان خواهیم داد.

$\rho g(r)dr$ احتمال مشاهده ی مولکول دوم در dr می باشد در صورتی که یک مولکول در مبدا وجود

داشته باشد. این احتمال به مقدار واحد بهنجار نمی شود بلکه در عوض خواهیم داشت:

$$\int_0^{\infty} \rho g(r)4\pi r^2 dr = N - 1 \approx N \quad (۷-۳)$$

این معادله نشان می دهد که $\rho g(r)4\pi r^2$ تعداد مولکول های بین r و $r + dr$ حول مولکول مرکزی می باشد.

در حقیقت با تقسیم فیزیکی فضای حجم درون قشر dr , در فاصله بین r و $r+dr$ از اتم مرجع تعداد اتمها

قابل محاسبه است

$$dn(r) = \frac{N}{V} g(r)4\pi r^2 dr \quad (۸-۳)$$

که N نشاندهنده تعداد کل اتمها و V نشان دهنده حجم و $g(r)$ تابع توزیع شعاعی یک سیال

اگر حجم هر لایه به صورت :

$$V_{shell} = \frac{4}{3}\pi(r+\delta r)^3 - \frac{4}{3}\pi r^3 \cong 4\pi r^2 dr \quad (۹-۳)$$

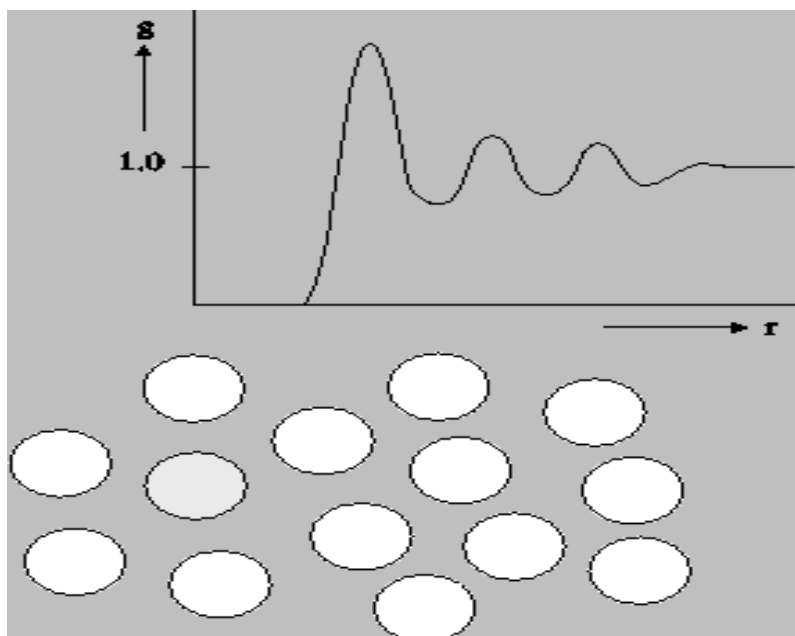
و اگر تعداد ذرات به واحد حجم $\rho = \frac{N}{V}$ باشد با شمارش تعداد اتمهای موجود در هر لایه که به کمک یک

عکس فوری بدست آمده و میانگین گیری تعداد اتمها در هر لایه و تقسیم حجم آن به حجم هر لایه خواهیم

داشت :

$$g(r) = n(r)(\rho 4\pi r^2 dr) \quad (۱۰-۳)$$

$g(r)$ همان تابع توزیع شعاعی است که علاوه بر r به دما و چگالی هم بستگی دارد.



شکل (۳-۱) تابع توزیع شعاعی

با توجه به شکل اولاً $\rho(r)$ باید به سمت صفر تمایل پیدا کند همچون r که به سمت صفر می رود، تا زمانیکه اجزای اضافی نمی توانند محل یکسانی را مثل جزء مرجع اشغال کنند. ثانیاً به طور کلی در فواصل زیاد اثر جزء اصلی یا (جزء مرجع) صفر می باشد و $\rho(r)$ باید به ρ نزدیک شود. ثالثاً، $\rho(r)$ ممکن است کمتر از ρ یا بیشتر از آن باشد، بسته به اینکه فاصله r با فواصل جاذبه و دافعه بین اجزا مطابق دارد.

برای مقادیر کوچک r تابع توزیع به سمت صفر میل میکند که بخاطر نیروهای قوی دافعه است که ذرات نمی توانند بیش از حد به هم نزدیک شوند در واقع دو ذره نمی توانند فضای یکسانی را در یک لحظه اشغال کنند. در خارج از شعاع واندروالس در رنجهای بالا پیکههایی وجود دارد که نشان می دهد اتمها در لایه های نزدیک در اطراف هم قرار گرفته اند. اولین پیکی که وجود دارد به این دلیل که $N-1$ ذره سعی میکنند داخل ناحیه ای که توسط ذره دیگر اشغال شده پخش شوند و سپس مقدار $g(r)$ کاهش می یابد که به این دلیل که

ذرات مازاد در پیک اول سبب کمبود ذرات به همان مقداری که ذرات پیش می روند می شود. در فواصل بزرگ $g(r)$ به سمت ۱ نزدیک میشود که این نشان می دهد در دامنه های بزرگ نظمی وجود ندارد.

۲-۳ اهمیت RDF

RDF به سه دلیل حائز اهمیت است :

۱- برای پتانسیل های جفتی:

$$U_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i < j} u(r_{ij}) \quad (11-3)$$

با داشتن RDF می توان خواص ترمودینامیکی به ویژه فشار، انرژی، و پتانسیل شیمیایی را محاسبه نمود.

۲- تئوری های معادلات انتگرالی بسیار توسعه یافته ای وجود دارند که امکان تخمین RDF را برای یک مدل مولکولی خاص می دهند .

۳- RDF به طور تجربی با استفاده از روش های پراش اشعه ی X و پراش نوترون قابل اندازه گیری می باشد این موارد را در قسمت های بعدی توضیح خواهیم داد .

۳-۳ روابط توابع ترمودینامیکی با RDF

محاسبه دقیق RDF مسئله ی اساسی در تئوری مایعات می باشد زیرا RDF خواص ترمودینامیکی ماکروسکوپی را به برهم کنش های بین مولکولی سیالات مرتبط می سازد. در اینجا، بعضی از این توابع ترمودینامیکی بیان می شوند و روش های بدست آوردن این توابع در کتاب های مرجع [۳،۴] توضیح داده شده است و در اینجا بحث نخواهد شد.

۳-۳-۱ انرژی

برای محاسبه یک انرژی گاز حقیقی کره ای از حجم $4\pi r^2 \partial r$ با یک ذره در مرکز را در نظر می گیریم که شامل $4\pi r^2 \rho g(r) \partial r$ ذره است، اگر پتانسیل جفت ذرات در فاصله r مقدار $u(r)$ باشد، انرژی برهم کنشی بین ذرات موجود در لایه و ذره موجود در مرکز $4\pi r^2 \rho g(r) u(r) \partial r$ خواهد بود که انرژی کل سیستم با در نظر گرفتن تقریب جمع پذیری جفتی و به کمک انتگرال گیری r از 0 تا ∞ و ضرب در $\frac{N}{2}$ به صورت زیر خواهد بود:

$$E = \frac{3}{2} k_B T + 2nNP \int_0^{\infty} r^2 U(r) g(r) dr \quad (12-3)$$

در این معادله جمله ی اول میانگین انرژی جنبشی و جمله ی دوم میانگین انرژی پتانسیل می باشد. که می توان نوشت.

$$\frac{\epsilon}{Nk_B T} = \frac{3}{2} + \frac{P}{2KT} \int_0^{\infty} 4\pi r^2 U(r) g(r) dr \quad (13-3)$$

۲-۳-۳ فشار

فشار سیستم با در نظر گرفتن تقریب جمع پذیری جفتی به صورت زیر بیان می شود:

$$P = \rho kT - \frac{\rho^2}{6} \int_0^\infty r \frac{\partial u}{\partial r} g(r) 4\pi r^2 dr \quad (۱۴-۳)$$

اغلب این معادله را معادله ی فشار می نامند.

اگر چه معادله ی فشار برای مایع بدست آمده است اما می توان برای گاز هم استفاده نمود زیرا در حد چگالی کم مایع به گاز تبدیل می شود. در حقیقت، می توان معادله ی (۱۴-۳) را معادله ی حالت سیال نامید.

۳-۳-۳ تراکم پذیری

یک معادله ی مهم و جالب معادله ی تراکم پذیری می باشد:

$$\rho kT \kappa_T = 1 + \rho \int_0^\infty 4\pi r^2 [g^{(2)}(r) - 1] dr \quad (۱۵-۳)$$

در این معادله κ_T تراکم پذیری هم دما است. لازم به ذکر است که در بدست آوردن معادله ی تراکم پذیری از تقریب جمع پذیری جفتی استفاده نشده است.

تابع $g(r)-1$ که اغلب تابع همبستگی کل نامیده می شود با $h(r)$ نشان داده می شود. هر گاه $r \rightarrow \infty$ تابع $h(r)$ به سمت صفر میل می کند به این معنی که هیچ همبستگی مکانی بین یک جفت مولکول نیست.

تبدیل فوریه ی $h(r)$ وقتی که در چگالی ضرب می شود، فاکتور ساختار نامیده می شود. بنابراین می توان

نوشت:

$$\hat{h}(s) = \rho \int h(r) e^{is \cdot r} dr \quad (۱۶-۳)$$

در این معادله $\hat{h}(s)$ نشان دهنده ی فاکتور ساختار می باشد. تراکم پذیری هم دما در $s = 0$ با فاکتور ساختار مربوط است. معمولاً محاسبه چنین خصوصیتی به طور مستقیم دقیقتر است این معادلات تنها برای سیستمهای کروی کاربرد برای سیستمهای پیچیده باید جهت گیری آنها نیز در نظر گرفته شود تئوری انتگرال کرک وود^۱ برای عین خواص ترمودینامیکی هر شکل از مولکول کاربرد دارد. [۱۴]

۳-۴ خواص مکانیکی

هرگاه نیروی مکانیکی بر سیالی اعمال شود، سیال ابتدا به صورت الاستیکی همانند جامد به این نیرو پاسخ می دهد. این پاسخ اولیه به کمک دو کمیت، حدفرکانس بالای کشیدگی برشی (یا کشیدگی سختی)^۲، G_∞ و حدفرکانس بالای ضریب کشیدگی، K_∞ (یا کشیدگی تراکم)^۳.

زوانزینگ و مونتین^۴ [۱۵] معادله ای برای وابستگی فرکانسی گرانروی برشی^۵ به دست آورند.

$$\eta_0 = \tau G_\infty \quad (۱۷-۳)$$

که η_0 گرانروی برشی در فرکانس صفر را نشان می دهد. ثابت تناسب τ زمان استراحت^۶ نامیده می شود. از آن جایی که واحدهای η_0 و G_∞ به ترتیب فشار \times زمان و فشار می باشد، τ واحد زمان را دارد [۱۶].

زمان استراحت مدت زمانی است که اغتشاش از حالت تعادلی ماکسولی به $1/e$ مقدار اولیه اش می رسد. [۱۶]

¹ Kirkwood-Buff

² Modulus of Rigidity

³ Modulus of Compression

⁴ Zwanzing- Mountain

⁵ Shear Viscosity

⁶ Relaxation Time

زوانزینگ و مونتاین [۱۵] رابطه‌ای بین تابع توزیع شعاعی (RDF) و G_{∞} برای مولکول‌های کروی از طریق رابطه‌ی زیر به دست آورند:

$$\text{در } G_{\infty}(\rho, T) = \rho kT + \frac{2\pi\rho^2}{15} \int_0^{\infty} g(r) \frac{d}{dr} [r^4 \frac{du(r)}{dr}] dr \quad (۱۸-۳)$$

این معادلات ρ ، $g(r)$ ، $u(r)$ و T به ترتیب پتانسیل جفتی بین ذره‌های، RDF، چگالی، دما و ثابت بولتزمن هستند.

۵-۳ روش‌های مختلف تعیین RDF

۱-۵-۳ تئوری معادله‌ی انتگرالی

اگر ما علاقه مند به گسترش توانایی پیش بینی در تئوری‌های مکانیک آماری هستیم، باید روشی برای بدست آوردن RDF پیدا کنیم.

یکی از تئوری‌های مهم RDF تئوری معادله‌ی انتگرالی می‌باشد. از آنجا که تابعی که تعیین می‌شود در داخل انتگرال قرار دارد این روش به نام معادله‌ی انتگرالی نامیده می‌شود. در اینجا به برخی از تئوری‌های معادلات انتگرالی مهم اشاره خواهد شد. [۳]

۱-۱-۵-۳ معادله‌ی انتگرالی کرک وود

یکی از مهم‌ترین و اولین معادلات برای RDF در دهه‌ی ۱۹۳۰ توسط کرک وود بدست آمد و به نام معادله‌ی کرک وود نامیده می‌شود [۳]. در اینجا پارامتر جفت شدن^۱ ξ را معرفی می‌کنیم که از ۰ تا ۱ تغییر

^۱ Coupling parameter

می کند و برهم کنش مولکول مرکزی به عنوان مثال مولکول ۱ را با زمین مولکول سیستم به صورت $\xi u(r_{1j})$ جایگزین می کند:

$$U(r_1, \dots, r_N, \xi) = \sum_{j=2}^N \xi u(r_{1j}) + \sum_{2 \leq i < j \leq N} u(r_{ij}) \quad (19-3)$$

لازم به ذکر است که می توان مولکول ۱ را با تغییر ξ از ۰ به ۱ به داخل یا خارج از سیستم منتقل کرد. اکنون معادله کرک وود را برای $\mathbf{g}(\mathbf{r})$ با استفاده از پارامتر جفت شدن معرفی می کنیم:

$$\begin{aligned} -kT \ln \rho^n(1, \dots, n, \xi) &= kT \ln \rho + kT \ln \rho_{N-1}^{n-1}(2, \dots, n) - \xi \sum_{j=2}^n u(r_{1j}) \\ &+ \frac{1}{N} \int_0^\xi \iint_V u(r_{12}) \rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \xi) [g(r_{23}) - 1] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\xi' \\ &- \int_0^\xi \int u(r_{1, n+1}) \frac{\rho^{(n+1)}(1, \dots, n, n+1, \xi)}{\rho^{(n)}(1, \dots, n, \xi)} d\mathbf{r}_{n+1} d\xi \end{aligned} \quad (20-3)$$

در این معادله ρ_{N-1}^{n-1} تابع توزیع در سیستمی شامل N-1 مولکول می باشد.

معادله ی (۲۰-۳) را می توان برای هر سیستم چگال بکار برد. اگر $n=2$ می توان $g^2(\mathbf{r}_{12})$ را به صورت

زیر نوشت:

$$-kT \ln g^{(2)}(1, 2, \xi) = \xi u(r_{12}) + \rho \int_0^\xi \int_V u(r_{13}) g(r_{13}; \xi') \left[\frac{g^{(3)}(1, 2, 3, \xi)}{g^{(2)}(1, 2, \xi)} - g^{(2)}(1, 3, \xi) \right] d\mathbf{r}_3 d\xi' \quad (21-3)$$

این معادله $g^{(2)}$ را بر حسب $g^{(3)}$ یا به طور کلی $g^{(n)}$ را بر حسب $g^{(n+1)}$ ارائه می کند. چنین معادلاتی را

تسلسلی می نامند. این معادله دقیق است ولی متأسفانه خیلی قابل استفاده نیست. اگر بتوان رابطه ی دیگری

برای $g^{(3)}$ بر حسب $g^{(2)}$ بدست آورد یک معادله ی بسته برای $g^{(2)}$ بدست می آید.

اگر تقریب ابرانطباق را برای g^3 در معادله ی (۳-۲۱) جایگزین کنیم معادله ی کرک وود برای $g(r)$ بدست

می آید یعنی:

$$-kT \ln g(r_{12}, \xi) = \xi u(r_{12}) + \rho \int_0^\xi \int_V u(r_{13}) g(r_{13}; \xi') [g(r_{23}) - 1] d\mathbf{r}_3 d\xi' \quad (22-3)$$

در این معادله وقتی که $0 \rightarrow \rho$ خواهیم داشت $g(r_{12}) = \exp\left[-\frac{\xi u(r_{12})}{kT}\right]$

راه حل عددی معادله ی کرک وود پیشنهاد شده است که بدست آوردن آن بسیار مشکل است. لازم به ذکر

است که $g(r_{12})$ بدست آمده از معادله ی کرک وود و معادلات دیگر تنها از لحاظ کیفی رضایت بخش هستند.

۳-۱-۵-۲ معادله ی انتگرالی بورن-گرین-یون^۱ (BGY)

معادله ی انتگرالی دیگری برای RDF وجود دارد که تا حدی شبیه معادله کرک وود بدست می آید. به

جای مشتق گیری نسبت به پارامتر جفت شدن، نسبت به مختصات بعضی از مولکول های خاص مشتق گرفته

می شود. این روش یک تسلسلی مشابه با معادله ی کرک وود ارائه می دهد که می توان آن را توسط تقریب

ابرانطباق^۲ خارج کرد. معادله ی BGY به صورت زیر می باشد:

$$kT \frac{\partial g^{(n)}}{\partial \mathbf{r}_1} + \sum_{j=2}^n \frac{\partial u_{1j}}{\partial \mathbf{r}_1} g^{(n)} + \rho \int \frac{\partial u_{1,n+1}}{\partial \mathbf{r}_1} g^{(n+1)} d\mathbf{r}_{n+1} = 0 \quad (23-3)$$

¹ Born-Green-Yvon

² Superposition approximation

۳-۱-۵-۳ معادله ی انتگرالی اورنشتاین - زرنیک^۱ (OZ)

تابع همبستگی کل به صورت زیر تعریف می شود:

$$h(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - 1 \quad (24-3)$$

برای یک سیال همگن $h(r_{12}) = g(r_{12}) - 1$. معیاری از تاثیر کلی مولکول ۱ روی مولکول ۲ در فاصله^۲

r_{12} می باشد (یعنی همبستگی کل بین ۱ و ۲).

در سال ۱۹۱۴، اورنشتاین و زرنیک $h(r_{12})$ را به دو قسمت، قسمت مستقیم و قسمت غیر مستقیم تقسیم کردند. قسمت مستقیم توسط تابع $C(r_{12})$ بیان می شود و تابع همبستگی مستقیم^۲ نامیده می شود. قسمت غیر مستقیم تاثیر مولکول ۱ روی مولکول ۳ را نشان می دهد که باز مولکول ۳ روی مولکول ۲ از طریق ذرات دیگر (مستقیم یا غیر مستقیم) تاثیر می گذارد. این تاثیر توسط چگالی متعادل شده و روی تمام جهت گیری های مولکول ۳ میانگین گرفته می شود شکل (۲-۳). مولکول ۱ از طریق همبستگی مستقیم با مولکول ۲ ارتباط دارد و مولکول ۱ به مولکول ۳ مستقیماً ارتباط دارد که خود مولکول ۳ با مولکول ۲ به طور مستقیم یا غیر مستقیم از طریق ذرات دیگر ارتباط دارد.

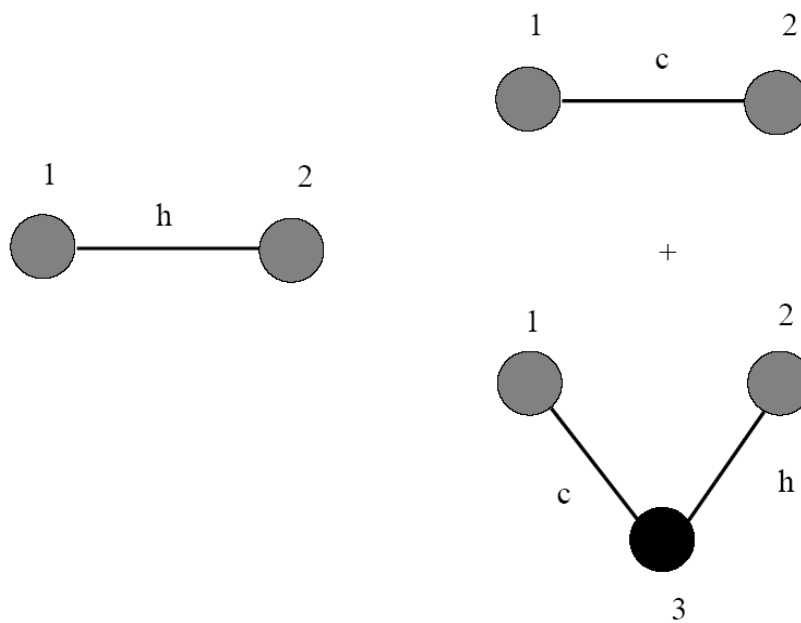
$$h(r_{12}) = c(r_{12}) + \rho \int c(r_{13}) h(r_{32}) d\mathbf{r}_3 \quad (25-3)$$

^۱ Ornstein-Zernike

^۲ total correlation function

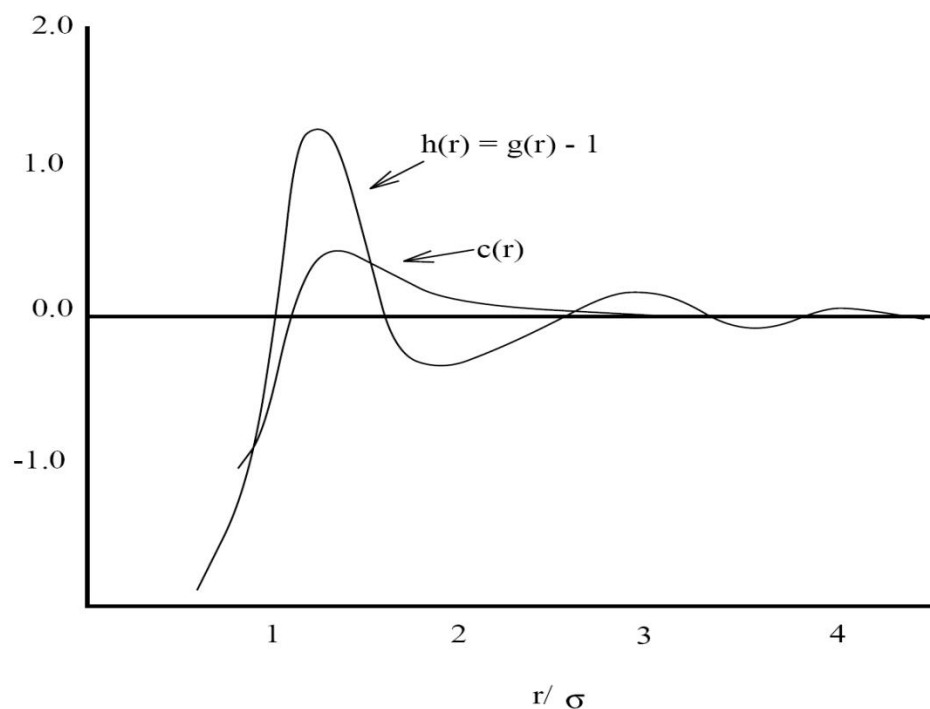
معادله ی (۳-۲۵) به عنوان معادله ی اورنشتاین- زرنیک (OZ) معروف است. اصولاً این معادله توصیف تابع همبستگی مستقیم $C(r)$ بر حسب تابع همبستگی کل $h(r)$ می باشد.

گستره ی همبستگی مستقیم $C(r)$ همانند پتانسیل جفتی است. این تابع نسبتاً سریع به صفر میل می کند اما رفتار غیر صفر تا فواصل متناسب با گستره ی پتانسیل از خود نشان می دهد. این تابع کوتاه بردتر از $h(r)$ می باشد. شکل (۳-۳) طرح کلی رفتار تابع همبستگی مستقیم را نشان می دهد. همان طور که این شکل نشان می دهد $h(r)$ نوساناتی به دلیل همبستگی های غیر مستقیم نشان می دهد.



شکل (۳-۲). تابع همبستگی کل و تابع همبستگی مستقیم

¹ direct correlation function



شکل (3-3). $h(r)$ و $C(r)$ برای یک سیال

2-5-3 شبیه سازی دینامیک مولکولی

شبیه سازی دینامیک مولکولی روشی مناسب برای مدل سازی میکروسکوپی در مقیاس اتمی و مولکولی فراهم می کند. این روشها با گسترش سریع امکانات رایانه ای و قدرت محاسباتی توسعه بسیار یافته اند و در حقیقت کاربرد رایانه ها در حل مسائل علمی یک نیروی رانشی قوی برای دستیابی به این پیشرفت ها است. از آنجا که شبیه سازیهای رایانه ای شامل حل دقیق مسائل مکانیک آماری هستند، خواص سیستم های مورد مطالعه با ارزیابی نیروها و انرژیهای بین مولکولی، که معمولاً توسط مدل های نظری تعریف می شوند، تعیین می گردند. دینامیک مولکولی شکلی از شبیه سازی کامپیوتری است که در آن اتمها و مولکولها اجازه دارند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته شده فیزیک باهم برهم کنش کنند و چشم اندازی از حرکت اتمها

بدهند. از آنجائیکه سیستمهای مولکولی عموماً شامل تعداد زیادی از ذرات هستند امکان پذیر نیست که ویژگیهای سیستمهای پیچیده را بطور تحلیلی بدست آوریم. شبیه سازی دینامیک مولکولی این مساله را با بکار بردن روش محاسباتی حل می کند. این روش یک واسطه بین تجربیات آزمایشگاهی و نظریه ایجاد می کند و به عنوان یک آزمایش مجازی در نظر گرفته می شود. دینامیک مولکولی روابط بین ساختار مولکولها، حرکت مولکولها و توابع مولکولی را بررسی می کند. دینامیک مولکولی یک روش منظم چندگانه است. قوانین و نظریه های آن از ریاضیات، فیزیک و شیمی بدست می آید و الگوریتم هایی را از علم رایانه و نظریه اطلاعات بکار می برد. فرایندی که در هسته مرکزی محاسبات یک برنامه شبیه سازی دینامیک مولکولی تکرار می شود عبارت است از نیروی بین ذرات < شتاب ذرات < سرعت ذرات < موقعیت جدید ذرات

به کمک اطلاعاتی که در مورد موقعیت و سرعت ذرات در لحظه t داریم و با طی پروسه فوق اطلاعات مربوط به لحظه $t+dt$ را به دست می آوریم. با مشتق گیری از پتانسیل بین اتمی، رابطه نیرو به دست می آید. و از آن به بعد از مکانیک نیوتونی استفاده می شود. ساده ترین و پرکاربردترین پتانسیل که برای ذرات اتمی به کار می رود به نام پتانسیل لnard-جونز معروف هست. منظور از پتانسیل، رابطه ای است که بین انرژی دو ذره و فاصله بین آنها برقرار است. چون این انرژی، انرژی پتانسیل سیستم مورد نظر (دو ذره) است به آن پتانسیل می گوئیم. رفتار سیستمی که از این پتانسیل تبعیت می کند شبیه به گازهای نجیب سبک مثل آرگون است برای بررسی خواص و ویژگی های مواد و یا برای مقایسه مواد، استفاده از پتانسیل های پیچیده تری مورد نیاز است تا معرف کامل ماده مورد نظر باشد. اما اگر بخواهیم موضوعاتی کلی مثل آنتروپی و رابطه آن با دمای یک سیستم یا هندسه عبور گاز از یک حفره کوچک را بررسی کنیم، پتانسیلی مانند پتانسیل لnard-جونز مناسب و مفید است. ساده گی پتانسیل از زمان شبیه سازی می کاهد و این بسیار مهم هست.

تصور کنید N اتم در سیستم وجود داشته باشد. اگر بخواهیم تا برهمکنش این اتم و $N-1$ دیگر را بدانیم، به ازای هر dt که به پیش می‌رویم باید $N(N-1)/2$ محاسبه‌ی نیرو انجام دهیم! و بنابراین هرچه پتانسیل ساده‌تری داشته باشیم محاسبات سریعتر انجام می‌شود.

1-2-5-3 مراحل شبیه سازی دینامیکی مولکولی

شبیه سازی دینامیکی مولکولی شامل ۳ مرحله است [3,17]:

۱. طراحی مدل

۲. محاسبه مسیر فضای فاز

۳. آنالیز مسیرها برای به دست آوردن خواص با میانگین گیری از آن خاصیت به کمک میانگین زمانی^۱

$$\langle A \rangle = \frac{1}{t} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t A(t) dt \quad (26-3) \quad 2-$$

2-5-3 معادله حرکت

دینامیک مولکولی تکامل زمانی سیستم ذرات را با استفاده از انتگرال گیری از معادله حرکت به دست

می‌آورد که به سه روش است: [3,17]

• روش نیوتونی

$$F = ma = \frac{mdv}{dt} = \frac{md^2v}{dt^2} \quad (27-3)$$

$$v = at + v_0 \rightarrow x = at^2 + tv_0 + x_0 \quad (28-3)$$

¹ Time average

که X را می توان در مبدا مختصات در نظر گرفت، $X=0$ و V به جز جامدات که صفر است برای بقیه از قانون ماکسول بولتزمن استفاده می شود چون در دمای خاص ذرات دارای انرژی جنبشی هستند.

• روش هامیلتونی

معمولا برای سیستمهای ایزوله که انرژی کل ثابت است در نظر گرفته می شود. در این حالت H با انرژی

کل برابر و به صورت:

$$H(r^N, P^N) = \frac{1}{2m} + \sum P_i^2 + u(r^N) = E \quad (29-3)$$

چون سیستم در حالت تعادل مورد بحث است با توجه به ثابت بودن انرژی از این فرمول نسبت به زمان مشتق میگیریم و در نهایت خواهیم داشت:

$$q_i^0 = \frac{\partial H}{\partial P_i} \quad , \quad -p_i^0 = \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (30-3)$$

• روش لانگرانژ

معمولا برای سیستمهای پیچیده تر به کار می رود.

$$L=K-U \quad , \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial l}{\partial \dot{p}_i^0} \right) - \left(\frac{\partial l}{\partial q_i^0} \right) = 0 \quad (31-3)$$

U

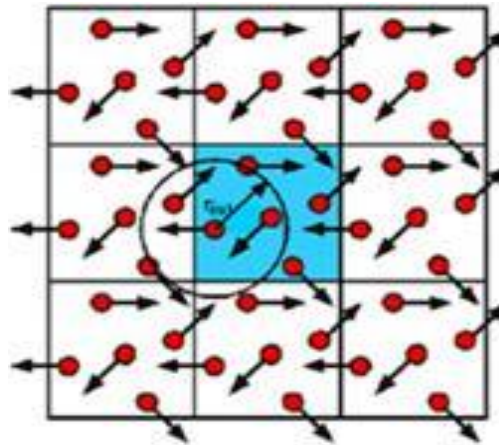
3-2-5-3 شرایط مرزی تناوبی¹

یک سیستم واقعی حداقل 10^{23} ذره دارد ولی در شبیه سازی حداکثر 10^3 ذره داریم هر چه تعداد ذرات کمتر می شود نسبت ذرات سطح به کل ذرات زیاد می شود پس اثرات سطحی موثر خواهند بود و باید در نظر گرفته شوند. این اثرات توابع ترمودینامیکی را تحت تاثیر می گذارد، بنابراین برای رفع این مشکل از روشی به

¹ Periodic boundary conditions

نام شرایط مرزی تناوبی (pbc) استفاده میکنند. در روش pbc یک سل با سلهای کاملا مشابه از اطراف احاطه شده است، سل مرکزی سلول واحد است. در طی یک دوره شبیه سازی هر وقت ذره ای از جعبه خارج شود یک ذره معادل از وجه مقابل وارد می شود و این باعث می شود که تغییر چگالی نداشته باشیم. [3,17]

شکل سل بسته به نوع سیستم متفاوت است، برای جامد مکعبی و برای گازها و مایعات نیز کروی است.



شکل (۳-۴) سل مکعبی با شرایط مرزی تناوبی

۳-۵-۲-۴ انساملهای شبیه سازی مولکول دینامیکی

- انسامل NVE با تعداد ذرات و چگالی و انرژی کل ثابت. انرژی پتانسیل از ابتدا ثابت است اما برای ثابت نگه داشتن انرژی جنبشی از مقیاس بندی سرعتها^۱ استفاده می شود.
- انسامل NVT استفاده از این انسامل راحتتر است زیرا ثابت نگه داشتن دما راحتتر است. برای این کار از سه روش استفاده می شود [3,17]:

^۱ Rescaling velocity

۱. مقیاس بندی سرعت

۲. استفاده از یک ظرف گرمایی فرضی با تعدادی اتم که در ارتباط با سیستم اصلی است. برخورد این

ذرات با ذرات موجود در سیستم باعث ایجاد یک نیروی تصادفی می شود این ظرف با کنترل تعداد برخوردها دما را ثابت نگه می دارد.

۳. ترموستات لانگوین^۱ در این روش نیز با تغییر نیرو دما ثابت نگه داشته می شود.

• انسامبل NPT فشار ثابت نگه داشته شود که توسط سه روش زیر انجام می شود:

۱. مقیاس بندی حجم

۲. استفاده از ترموستات

۳. هیبرید مولکول دینامیکی و مونت کارلو

۳-۲-۵ محاسبه خواص ترمودینامیکی به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی

خواصی که در شبیه سازی استفاده می شوند به چند دسته تقسیم می شوند: [3,17]

الف) توابع ترمودینامیکی ساده: فشار و انرژی داخلی مثالهایی از توابع ترمودینامیکی ساده اند. برای سیستمی

شامل N ذره مسیر فضای فاز توسط یک سری اعداد M نشان داده می شود. با استفاده از این $\langle A \rangle$ ، هر تابعی

از مسیر حرکت با استفاده از جمع زیر تخمین زده می شود:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M A[r^N(k\Delta t), p^N(k\Delta t)] \quad (3-32)$$

¹ Langevin thermostat

• انرژی: سیستمی با N ذره و حجم V و دمای T دارای انرژی کل وابسته به اندازه حرکت و مکان است.

$$E(\mathbf{P}^N, \mathbf{r}^N) = E_k(\mathbf{p}^N) + U(\mathbf{r}^N) \quad (33-3)$$

که شامل دو قسمت انرژی جنبشی و انرژی پیکربندی می باشد که میانگین انرژی جنبشی به صورت زیر است:

$$\langle K \rangle = \frac{1}{2mM} \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N P_i(k\Delta t), P_i(k\Delta t) \quad (34-3)$$

و برای کرات نرم انرژی پتانسیل به صورت معادله (34-3) است:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \sum_i \sum_{j>i} u[r_{ij}(k\Delta t)] \quad (35-3)$$

U انرژی پتانسیل دو ذره ای است.

• فشار: فشار به کمک معادله حالت ویریا با کمیت‌های مولکولی در ارتباط است.

$$\frac{P}{\rho KT} = 1 - \frac{1}{3NKT} \left\langle \sum_i \sum_{j>i} \mathbf{r}_{ij} \cdot \frac{d\mathbf{u}(\mathbf{r}_{ij})}{d\mathbf{r}_{ij}} \right\rangle \quad (36-3)$$

که \mathbf{r}_{ij} فاصله بین مولکولی و N تعداد ذرات است.

(ب) توابع ترمودینامیکی پاسخ¹:

پاسخ توابع ترمودینامیکی به تغییراتی که در دما و فشار روی می دهد. لذا مشتق توابع ترمو دینامیکی را

توابع پاسخ می گویند. ساده ترین تابع که می توان محاسبه کرد C_V است.

$$C_V = \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_v \quad (37-3)$$

(ج) خواص ساختاری:

¹ Response

منظور محاسبه RDF است. تابع توزیع شعاعی در واقع نشان دهنده احتمال حضور ذرات در یک فاصله

مشخص از یک ذره معین است. در واقع نظم موضعی را نشان می دهد و به صورت $g(r) = \frac{\rho(r)}{\rho}$ است.

$$\rho(r) = \frac{\langle N(r, \Delta r) \rangle}{V(r, \Delta r)}$$

$$g(r) = \frac{\langle N(r, \Delta r) \rangle}{\frac{1}{2} N \rho V(r, \Delta r)}$$

به دلیل برهمکنش های جفتی داریم:

و در نهایت خواهیم داشت:

$$g(r) = \frac{\sum_{K=1}^M N_K(r, \Delta r)}{\frac{1}{2} M N \rho V(r, \Delta r)} \quad (38-3)$$

(د) خواص دینامیکی

یک خاصیت مهم میانگین مربع جابجایی (MSD)¹ می باشد. [3,17] که در حقیقت میانگین فاصله ای

است که ذره طی می کند و در تعیین ضریب نفوذ کاربرد دارد:

$$\Delta r^2 = \langle |r_i(t) - r_i(0)|^2 \rangle \rightarrow D = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle \quad (39-3)$$

۳-۵-۳ روش های تجربی

یکی از دلایلی که تابع توزیع شعاعی را مهم جلوه داده اندازه گیری آن به کمک روشهای تجربی است که

به وسیله آزمایشات شکست پرتو X، شکست نوترون در اتمهای مایع، روشهای SAXS، SANS (یا

شکست نور در سوسپانسیونها) کلوئیدی انجام می شود.

در شکست پرتو X نظم اتمها در یک کریستال یک الگو مشخصی از شکست پرتو X با نقاط تیز می دهد.

¹ Mean square displacement

برای مایعات الگوی شکست دامنه هایی با شدت بالا و پایین اما بدون نقاط تیز می دهد. در نهایت الگوی شکست پرتو X برای تخمین زدن تابع توزیع شعاعی آنالیز می شود که نتیجه حاصله با نتایج شبیه سازی دیگر مقایسه می شود.

یک الگو از اندازه گیری تجربی RDF در شکل نشان داده شده که معادله ان به صورت زیر است [۳]:

$$(40-3)$$

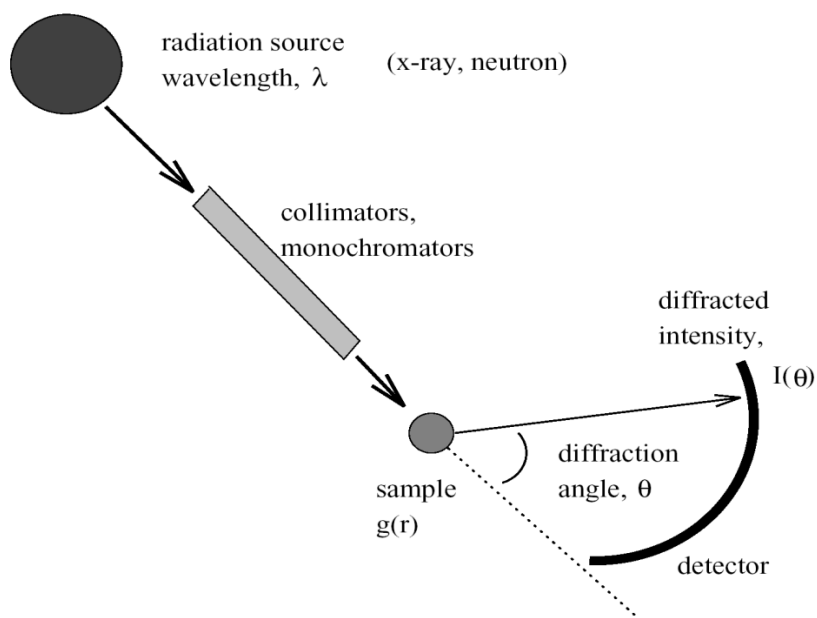
$$S(\mathbf{k}) = N \frac{I(\theta)}{I(0)}$$

N: تعداد پراکنده‌گرها

S(k): فاکتور ساختاری

I(θ): شدت شکست در زاویه θ

I(0): شدت شکست زمانی که θ به سمت 0 میل میکند



شکل (۳-۵) اندازه گیری RDF

از طریق یک سری استدلالهای هندسی داریم:

$$S(\mathbf{k}) = 1 + \rho \int g(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (41-3)$$

برای یک سیال ایزوتروپیک^۱ $S(\mathbf{k}) = S(k)$ بنابراین خواهیم داشت:

$$S(k) = 1 + \rho \int 4\pi r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} g(r) dr \quad (42-3)$$

با توجه به $S(k)-1$ تغییر شکلی از RDF است پس به راحتی می توانیم تابع توزیع شعاعی را اندازه بگیریم:

$$\rho g(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) [S(\mathbf{k}) - 1] d\mathbf{k} \quad (43-3)$$

و در نهایت با توجه به اینکه برای یک سیال ایزوتروپیک $g(\mathbf{r}) = g(r)$ خواهیم داشت:

$$\rho g(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty 4\pi k^2 \frac{\sin(kr)}{kr} [S(k) - 1] dk \quad (44-3)$$

۳-۶ معادلات $g(\mathbf{r})$ پیشنهاد شده برای سیالات LJ و HFD

۳-۶-۱ متئولی و منصور [13]:

متئولی و منصور برای بیان RDF برای سیالات LJ معادله ای ارائه کردند که به صورت معادله (۳-۶) است:

است:

$$g(y) = 1 + y^m [g(d) - 1 - \lambda] + [(y-1) + \lambda] \{ \exp[-\alpha(y-1)] \cos[\beta(y-1)] \}, m \geq 1, y \geq 1 \quad (45-3a)$$

$$g(y) = g(d) \exp[-\theta(y-1)^2], \quad y < 1 \quad (45-3b)$$

که $y=r/d$ فاصله بین مولکولی و $\alpha, \beta, \theta, \lambda, h=d/\theta$ و $m, g(d)$ پارامترهای تنظیم پذیری هستند که برای

¹ isotropic

اینکه معادله RDF تابعی از درجه حرارت و چگالی کاهش یافته باشد این پارامترها باید تابعی از درجه حرارت و چگالی باشند .

۳-۶-۲ عبارت مرسلی و همکارانش [1] :

مرسلی و همکارانش [1] یک بیان ساده و دقیق برای RDF سیالات لنارد جونز به عنوان یک تابع وابسته به فاصله بین مولکولی و دما و چگالی کاهش یافته ارائه دادند که توانایی پیش بینی خواص ترمودینامیکی را دارد . که RDF آن به صورت g_2 معادله (۳-۶) نشان داده شده و برای محاسبه فشار و انرژی داخلی و حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیال نئون با استفاده از پتانسیل لنارد جونز به کار می رود.

$$g_{2a} = 1 + (x)^{-2} \exp[-(a_2x + b_2)] \sin[(c_2x + d_2)] + (x)^{-2} \exp[-(q_2x + h_2)] \cos[(k_2x + l_2)], x > 1 \quad (46-3)a$$

$$g_{2b} = s_2 \exp[-(m_2x + n_2)^4] \quad , \quad x > 1 \quad (46-3)b$$

که $a_2, b_2, c_2, d_2, q_2, h_2, k_2, l_2, m_2, n_2, s_2$ پارامترهای تنظیم پذیری اند که تابعی از دما و چگالی هستند. مقادیر این پارامترهای قابل تنظیم در مرجع [1] داده شده است.

3-6-3 عبارت گوهرشادی و عباسپور [18]

گوهرشادی و عباسپور عبارت RDF زیر را برای سیالات شبه HFD فقط برای داده های تعادلی مایع -

بخار پیشنهاد کرده اند که با g_1 مشخص کرده ایم:

$$g_{1a} = 1 + (x)^{-2} \exp[-(a_1x + b_1)] \sin[(c_1x + d_1)] + (x)^{-2} \exp[-(q_1x + h_1)] \cos[(k_1x + l_1)] \quad x > 1 \quad (47-3)a$$

$$g_{1b} = s_1 \exp[-(m_1x + n_1)^4] \quad x < 1 \quad (47-3)b$$

فصل چهارم

نتایج و بحث

۱-۴ نتایج

عبارتهایی که در مکانیک آماری برای محاسبه فشار و انرژی داخلی مطرح شده به صورت روابط زیر می باشد:

$$P = \rho kT - \frac{2\pi\rho^2}{3} \int_0^\infty r^3 \frac{\partial U(r)}{\partial r} g(r) dr \quad (1-4)$$

$$E = \frac{3kT}{2} + 2\pi\rho \int_0^\infty r^2 U(r) g(r) dr \quad (2-4)$$

که r فاصله بین مولکولی و ρ دانسیته و $U(r)$ پتانسیل بین مولکولی و $g(r)$ نیز RDF می باشد. [1]

زوانزیگ و موانتاین [15] فرمول مربوط به حد فرکانس بالای کشیدگی برشی G_∞ ، را با استفاده از

RDF برای سیالات برهم کنش دهنده با یک پتانسیل متقارن کروی به صورت زیر بیان کرده اند:

$$G_\infty = \rho kT + \frac{2\pi}{15} \rho^2 \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r} \left(r^4 \frac{\partial U(r)}{\partial r} \right) g(r) dr \quad (3-4)$$

۲-۴ سیستم ارگون

۱-۲-۴ پتانسیل بین مولکولی ارگون

برای برهم کنشهای جفتی بین اتمهای ارگون، پتانسیل شبه HFD استفاده شده است که از وارونگی

انتگرال برخورد و ویسگوزیته در فشار صفر به دست آمده است [42,41]:

$$U_{Two-Body,a}^* = A \exp(-\alpha^* x + \beta^* x^2) - F(x) \left(\frac{C_6^*}{x^6} + \frac{C_8^*}{x^8} + \frac{C_{10}^*}{x^{10}} \right) \quad x < D \quad (4-4)$$

$$U_{Two-Body,b}^* = A \exp(-\alpha^* x + \beta^* x^2) - \left(\frac{C_6^*}{x^6} + \frac{C_8^*}{x^8} + \frac{C_{10}^*}{x^{10}} \right) \quad x > D \quad (5-4)$$

$$F(x) = \exp\left[-\left(\frac{D}{x} - 1\right)^2\right] \quad (6-4)$$

که در آن $U_{\text{Two-Body}}^*$ پتانسیل جفتی ($U_{2B}^* = U_{2B}/\varepsilon$) و $x = r/\sigma$ (ε عمق چاه پتانسیل و σ فاصله ای که در آن پتانسیل صفر است) تبدیل می باشد. مقادیر پارامترهای پتانسیل شبه HFD برای ارگون در جدول ۱ داده شده است.

برهمکنشهای سه ذره ای^۱ [19] میتوانند سهم کوچک اما موثر برای انرژی سیالات ایجاد کنند. برای دستیابی به یک تطابق مقداری با تجربه، پتانسیل جفتی باید همراه با برهمکنشهای سه ذره ای استفاده شود. [20]

سهم های زیادی برای برهمکنشهای سه ذره ای وجود دارد اما شواهدی نشان داد [21] که عبارت دوقطبی-سه جزئی^۲ اکسیل رود-تیلور^۳ [22] به تنهایی تقریبی عالی می باشد. با این وجود نیاز به محاسبات سه ذره ای به منظور محاسبات جفتی هزینه محاسباتی قابل ملاحظه ای ارائه می دهد. [20]

هاوسچایلد و پراسنیتز [8] یک عبارت تصحیحی سه ذره ای به ضمیمه پتانسیل دو ذره ای کیهارا^۴ برای ارگون که شامل انرژی پتانسیل جاذبه^۴ دو ذره ای (U_{2B-ATT}) بود پیشنهاد کرده اند:

$$U_{\text{Three-Body}}^* = \alpha \left(\frac{\rho}{\rho_C}\right)^{0.9} U_{2B-ATT}^* \quad (7-4)$$

¹ Three body

² Triple-dipole

³ Axilrod-Teller

⁴ Kihara

در اینجا α پارامتر قابل تنظیم می باشد و ρ_c چگالی در نقطه بحرانی مایع-بخار است. مقادیر α و ρ_c برای ارگون در جدول داده ۱ شده است. توان ۰,۹ و وابستگی دانسیته به منظور به دست آوردن تطابق بهتر با دادهای تجربی در دانسیته های بالا انتخاب می شود. پتانسیل کاهش یافته کل توسط رابطه زیر داده شده است:

$$U_T^* = U_{Two-Body}^* - \alpha \left(\frac{\rho}{\rho_c} \right)^{0.9} U_{2B-ATT}^* \quad (8-4)$$

این معادله به ما اجازه استفاده از پتانسیل دو ذره ای را برای پیش بینی خواص سیالت واقعی بدون متحمل شدن هزینه های محاسباتی پتانسیلهای سه ذره ای میدهد. معادله (۷-۴) از شرایط تناوبی مرزی که وقتی که $\rho \rightarrow 0$, پتانسیل دو ذره ای باز یابی می شود پیروی می کند. معادله (۸-۴) در این کار به همراه پتانسیل شبه HFD مورد استفاده قرار گرفته است که در آن U_{2B-ATT}^* به صورت زیر است:

$$U_{2B-ATT}^* = \begin{cases} -F(x) \left(\frac{C_6^*}{x^6} + \frac{C_8^*}{x^8} + \frac{C_{10}^*}{x^{10}} \right) & x < D \\ - \left(\frac{C_6^*}{x^6} + \frac{C_8^*}{x^8} + \frac{C_{10}^*}{x^{10}} \right) & x > D \end{cases} \quad (9-4)$$

وانگ و سادوس نشان دادند [9] که یک رابطه ساده و دقیقی بین انرژی های دو ذره ای و سه ذره ای

در یک سیال به صورت زیر وجود دارد:

$$U_{Three-Body} = - \frac{0.85v \rho U_{Two-Body}}{\epsilon \sigma^6} \quad (10-4)$$

در اینجا v ضریب جمع نا پذیر و ρ چگالی عددی می باشد.

پتانسیل برهمکنش یافته کل یعنی پتانسیل دو ذره ای و سه ذره ای, (U_T^*) , رابطه زیر است:

$$U_T^* = U_{Two-Body}^* \left[1 - \frac{0.85v \rho}{\epsilon \sigma^6} \right] \quad (11-4)$$

این معادله به ما اجازه استفاده از پتانسیل دو ذره ای را برای پیش بینی خواص سیالت واقعی بدون متحمل شدن هزینه های محاسباتی پتانسیل سه ذره ای میدهد. معادله (۱۱) در این کار به همراه پتانسیل شبه HFD مورد استفاده قرار گرفته است. ما همچنین عبارت اسمیت^۱ و همکارانش [43] را برای محاسبه فشار پیکربندی هنگامیکه پتانسیل کل استفاده می شود بکار برده ایم.

اخیرا گیزمن و همکارانش یک مدل برای برهمکنش موثر دو قطبی-سه جزئی بر پایه محاسبات دقیق تاثیرات سه ذره ای روی ضریب سوم ویریاال تهیه کرده اند. برهمکنش موثر سه ذره ای به صورت دانسیته مستقل از پتانسیل دو ذره ای نوشته می شود و به وسیله میانگین گرفتن از تابع روی موقعیت جزء سوم به دست می آید:

$$U_T^* = U_{Two-Body}^* + \langle U_{Three-Body}^* \rangle \quad (12-4)$$

U_T^* در اینجا پتانسیل کل کاهش یافته (دو ذره ای + سه ذره ای) و $\langle U_{Three-Body}^* \rangle$ به معنی میانگین پتانسیل سه ذره ای می باشد و می تواند توسط تابع زیر تقریب داده شود:

$$\langle U_{Three-Body}^* \rangle = v^* \alpha(T, s) \rho_1 \frac{e^{-2(y-1)}}{y} \quad (13-4)$$

در اینجا $\alpha(T, s)$, $v^* (= v/\epsilon \delta^9)$ ضریب جمع ناپذیر کاهش یافته می باشد و δ عمق چاه پتانسیل است.

$\rho_1 = \rho \delta^3$ و $y (= r/\delta)$ و $\alpha(T, s)$ توسط رابطه زیر داده شده است:

$$\alpha(T, s) = \alpha_0(s) + \alpha_1(s)\beta + \alpha_2(s)\beta^2 + \alpha_3(s)\beta^3 + \alpha_4(s)\beta^4 \quad (14-4)$$

که $\beta = 1/T^*$ ($T^* = kT/\epsilon$) و $\alpha_n(s)$ با s به آرامی تغییر میکند و با چند جمله ای های درجه دوم با s متناسب است:

¹ Smit

$$\alpha_n(s) = \alpha_{n0} + \alpha_{n1}s + \alpha_{n2}s^2 \quad (15-4)$$

که در آن s به سادگی یک اندازه بدون بعدی از حجم پتانسیل ارائه می دهد. پارامترهای معادله (۴-۱۳) تا

(۴-۱۵) در جدول ۱ و مرجع [10] داده شده است. معادله (۴-۱۲) در این کار به همراه پتانسیل شبه HFD دو ذره ای به کار رفته است.

۴-۲-۲ RDF ارگون

در این کار از ۳۸۴ RDF برای سیال شبه HFD به صورت تابعی از فاصله کاهش یافته در محدوده دمایی

کاهش یافته $(T^* = kT/\epsilon)$ و چگالی کاهش یافته $(\rho^* = \rho\sigma^3)$ از $0.5 \leq T^* \leq 5.1$ و $0.35 \leq \rho^* \leq 1.1$ با

استفاده از شبیه سازی MD به دست آمده و با معادلات زیر (که در ابتدا توسط گوهر شادی و عباسپور

گزارش شده بود [18])، با میانگین درصد انحراف ۲٪ نسبت به داده های شبیه سازی شده، فیت شد:

$$g_{1a} = 1 + (x)^{-2} \exp[-(a_1 x + b_1)] \sin[(c_1 x + d_1)] + (x)^{-2} \exp[-(q_1 x + h_1)] \cos[(k_1 x + l_1)] \quad x > 1 \quad (16-4)$$

$$g_{1b} = s_1 \exp[-(m_1 x + n_1)^4] \quad x < 1 \quad (17-4)$$

که $a_1, b_1, c_1, d_1, q_1, h_1, k_1, l_1, m_1, n_1$ و s_1 پارامترهای قابل تغییر می باشند و در جدول ۲ نشان داده شده اند.

RDF های محاسبه شده ارگون (با استفاده از معادلات (16-4) و (17-4) در ۳ نقطه حالت مختلف با

شبیه سازی های MD و با نتایج تجربی [23] در شکل ۱ مقایسه شده اند. در این شکل انطباق خوبی بین

مقادیر محاسبه شده ما و مقادیر تجربی وجود دارد. مارچلی [20]، عباسپور و گوهر شادی [18] نتیجه گرفتند

¹ Marcelli

که تفاوت‌های مشخصی بین RDF های محاسبه شده به وسیله پتانسیلهای کل و دو ذره ای وجود ندارد. نتیجه مشابهی توسط قهرمانی و عباسپور [24] و عباسپور [25] به دست آمده است. بنابراین معادلات (4-16) و (4-17) همچنین با پتانسیل کل برای محاسبات خواص سیال ارگون مورد استفاده قرار گرفته است.

۳-۴ جزئیات شبیه سازی

مقادیر مورد نیاز RDF های ارگون توسط شبیه سازی MD به همراه پتانسیل شبه HFD (معادلات (3-4) و (4-5)) محاسبه شده است. شبیه سازی MD توسط نرم افزار Moldy [34] برای یک سیستم ۱۰۰۰ اتمی ارگون در یک جعبه مکعبی با شرایط مرزی تناوبی انجام شده است. اندازه گامهای زمان، Δt ، تعداد گامهای زمان، n_t

و شعاع برش، r_c ، به ترتیب به صورت 0.01 ps، 100,000 (زمان رسیدن به تعادل ۵۰ هزار گام و زمان تولید ۵۰ هزار گام است) و 3σ انتخاب شده است

۴-۴ نتایج و بحث ارگون

عبارتهای مکانیک آماری (معادلات (۱-۴) تا (۳-۴)) برای محاسبه فشار کاهش یافته ($P^* = P\sigma^3/\epsilon$) و انرژی داخلی کاهش یافته ($E^* = E/\epsilon$) و حد فرکانس بالای کشیدگی برشی ($G_{\infty}^* = G_{\infty}\sigma^3/\epsilon$) ارگون سیال به کار رفته در پتانسیل دو ذره ای شبه HFD (معادلات (۵-۴) و (۴-۴)) و معادلات RDF (معادلات (4-16) و (4-17)) به صورت زیر مورد استفاده قرار گرفته است:

$$P^* = \rho^* T^* - \frac{2\pi\rho^*{}^2}{3} \left[\int_0^1 x^3 \frac{\partial U_{Two-Body,a}^*}{\partial x} g_{1a} dx + \int_1^D x^3 \frac{\partial U_{Two-Body,a}^*}{\partial x} g_{1b} dx + \int_D^{\infty} x^3 \frac{\partial U_{Two-Body,b}^*}{\partial x} g_{1b} dx \right] \quad (18-4)$$

$$E^* = \frac{3}{2} T^* + 2\pi \rho^* \left[\int_0^1 x^2 U_{Two-Body,a}^* g_{1a} dx + \int_1^D x^2 U_{Two-Body,a}^* g_{1b} dx + \int_D^\infty x^2 U_{Two-Body,b}^* g_{1b} dx \right] \quad (19-4)$$

$$G_\infty^* = \rho^* T^* + \frac{2\pi \rho^{*2}}{15} \left[\int_0^1 \frac{\partial}{\partial x} \left(x^4 \frac{\partial U_{Two-Body,a}^*}{\partial x} \right) g_{1a} dx + \int_1^D \frac{\partial}{\partial x} \left(x^4 \frac{\partial U_{Two-Body,a}^*}{\partial x} \right) g_{1b} dx + \int_D^\infty \frac{\partial}{\partial x} \left(x^4 \frac{\partial U_{Two-Body,b}^*}{\partial x} \right) g_{1b} dx \right] \quad (20-4)$$

نتایج سیال ارگون با استفاده از پتانسیل دو ذره ای شبه HFD با مقادیر تجربی در دما و دانسیته های مختلف مقایسه شده اند (شکل 2-4). نتایج کلی (دو ذره ای و سه ذره ای) سیال ارگون با استفاده از پتانسیل - های سه ذره ای هاوسچایلد و پراسنیتز [8]، وانگ و سادوس [9] و گیوزمن [10] با استفاده از معادلات (18-4) تا (20-4) توسط جایگزینی $U_{Two-Body}^*$ با U_T^* از معادلات (8-4) و (11-4) و (12-4) محاسبه شده اند. و در شکل (2-4) ارائه شده است.

همانطور که شکل (2-4) نشان می دهد پتانسیل سه ذره ای وانگ و سادوس اثر خیلی کوچکی روی مقادیر دو ذره ای دارد ولی پتانسیل سه ذره ای هاوسچایلد و پراسنیتز نتایج فشار را برای رسیدن به تطابق بیشتر با تجربه بهبود داده است. از طرف دیگر پتانسیل هاوسچایلد و پراسنیتز تاثیر بیشتری بر روی نتایج نسبت به سایر پتانسیلها دارد. همچنین نشان داده شده است که پتانسیل سه ذره ای گازمن [10] فقط مقادیر فشار را در بعضی نقاط در دماهای پایینتر بهبود داده است. همچنین مشخص می شود که تاثیرات سه ذره ای در دانسیته های بالاتر بیشتر می شود.

بر طبق شکل (3-4) اگر چه پتانسیل های سه ذره ای وانگ و سادوس و گیوزمن تاثیرات کوچکی بر روی انرژی دو ذره ای دارند ولی پتانسیل های سه ذره ای گیوزمن مقادیری را در دانسیته های بالاتر جاییکه

پتانسیلهای سه ذره ای نمایان است بهبود بخشیده است. همچنین نشان داده شده است که پتانسیل سه ذره ای هاسچایلد و پراسنیتز مقادیر انرژی را افزایش داده و از مقدار تجربی منحرف کرده است. علت اینکه چرا پتانسیل سه ذره ای هاسچایلد و پراسنیتز مقادیر انرژی را بهبود نداده است (اما فشار را بهبود داده) میتواند به خاطر پارامتر تنظیم پذیر (α) که باشد که توسط مقایسه بین دانسیته های مایع در یک دمای ثابت و داده های تجربی (بر طبق روش هاسچایلد و پراسنیتز) به دست می آید. [8] ما همچنین تاثیرات سه ذره ای را روی حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیال ارگون در شکل (۴-۴) بررسی کردیم. همانطور که این شکل نشان میدهد هر دو پتانسیل سه ذره ای وانگ - سادوس و گیوزمن مقادیر یکسانی را با پتانسیل دو ذره ای نشان می دهد. اما پتانسیل سه ذره ای هاسچایلد و پراسنیتز نتایج دو ذره ای را کاهش می دهد. همانطور که در نتایج انرژی شرح دادیم دلیل رفتار متفاوت هاسچایلد و پراسنیتز در مقایسه با پتانسیلهای سه ذره ای دیگر می تواند به خاطر پارامترهای تنظیم پذیر (α) باشد. آنچه ما می دانیم این است که هیچ داده نظری یا تجربی برای سیالات شبه HFD برای مقایسه وجود ندارد.

۴-۵ سیستم نئون

۴-۵-۱ پتانسیل بین مولکولی نئون

سیستم های مولکولی کرومی همچون گازهای نادر در یک محدوده دمایی و دانسیته ای مورد استفاده، در برهم کنشهای جفتی LJ خیلی زیاد مورد مطالعه قرار گرفته اند. بنابراین پتانسیل کاهش یافته LJ به صورت یک پتانسیل کلاسیک برای نئون مورد استفاده قرار گرفته است:

$$U_{class}^* = 4(x^{-12} - x^{-6}) \quad (21-4)$$

که $x = r/\sigma$ و $U_{class}^* = U_{class}/\epsilon$ است. مقدار پارامترهای پتانسیل LJ برای نئون در جدول (4-1) داده شده است. برای یک سیال همچون نئون اثرات کوانتومی نمیتواند در نظر گرفته نشود و غفلت از این اثرات می تواند هنگامیکه نتایج تجربی و تئوری با هم مقایسه می شود دلیلی برای ناهمخوانی غیر قابل تقلیل باشد. [26,27]

دو نگرش برای در نظر گرفتن تاثیرات کوانتومی پیشنهاد شده است، پتانسیلهای فاینمن-هییس¹ (FH), [33] و ویگنر-کرک وود² (WK). [31,32] پتانسیل FH در این کار منجر به پتانسیل جفتی وابسته به دما و اجرای اسان در یک شبیه سازی مولکولی دینامیکی استاندارد (MD) یا کد همانند سازی مونت کارلو (MC)³ شده است. [26]

پتانسیل FH توسط مولفان مختلف برای شبیه سازی خواص ترمو دینامیکی و ساختاری سیستمهایی همچون هلیوم، نئون و هیدروژن مورد مطالعه قرار گرفته است. [26-30] اما هیچکس از تابع FH برای بررسی تاثیرات کوانتومی در محاسبه خواص ترمو دینامیکی RDF استفاده نکرده است. پتانسیل های WK و FH در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفته اند. پتانسیل موثر کوانتومی WK به دلیل عملکرد خوب آن برای گونه ای از مایعات تقریباً کلاسیک ساده انتخاب شده است. [34-37] پتانسیل WK از بسط تابع تقسیم در توانهای \hbar ناشی می شود [31,32]:

¹ Feynman-Hibbs

² Wigner- Kirkwood

³ Monte Carlo

$$U_{WK}^* = U_{class}^* - T^* \log \left[1 - \frac{\hbar^2}{24T^{*2} \mu \sigma^2 \varepsilon} \left(U_{class}^{*''} + \frac{2U_{class}^{*'}}{x} - \frac{U_{class}^{*2}}{2T^*} \right) \right] \quad (22-4)$$

در اینجا $\mu = m/2$ و m جرم یک اتم و T^* دمای کاهش یافته ($T^* = kT/\varepsilon$) می باشد. $U_{class}^*(x)$ پتانسیل کاهش یافته LJ کلاسیک (معادله 4-21) می باشد و $U_{class}^{*''}$ و $U_{class}^{*'}$ مشتقهای اول و دوم مربوطه می باشند.

اخیرا تچوار و همکارانش¹ [26] نشان دادند که تصحیحات کوانتومی برای نئون با استفاده از پتانسیل FH که از تابع تقسیم کوانتومی بدست آمده است برای یک مجموعه از اتمها، برتر از پتانسیل WK بوده و توانایی تصحیح ناهمخوانی موجود بین شبیه سازی تجربی و کلاسیک، برای خواص ترمودینامیکی و ضرائب انتقال را دارا می باشد. بنابراین پتانسیل FH همچنین به همراه پتانسیل کاهش یافته کلاسیک LJ به صورت زیر به کار رفته است:

$$U_{FH}^* = U_{class}^* + \frac{\hbar^2}{24T^{*2} \mu \sigma^2 \varepsilon} \left[U_{class}^{*''} + \frac{2U_{class}^{*'}}{x} \right] \quad (23-4)$$

همانطور که معادلات (۲۲-۴) و (۲۳-۴) نشان می دهند پتانسیلهای کوانتومی WK و FH به صورت جمع پتانسیل کلاسیک و یک عبارت تصحیح کوانتومی که به جرم و دما وابسته است ظاهر می شود.

۲-۵-۴ RDF های نئون

مرسلی و همکارانش [1] یک عبارت ساده و دقیق برای RDF سیالات لنارد جونز به عنوان تابع وابسته به فاصله بین مولکولی و دما و چگالی کاهش یافته ارائه دادند که توانایی پیش بینی خواص ترمودینامیکی را دارد.

¹ Tchouar

که این RDF به صورت g_2 نشان داده شده (معادلات (46-3)a و (46-3)b) و برای محاسبه فشار و انرژی داخلی و حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیال نئون با استفاده از پتانسیل لنارد جونز به کار می رود. مقادیر این پارامترهای تنظیم پذیر در مرجع [1] داده شده است. تجزیه نشان داده که هیچ تفاوت مشخصی بین RDF حاصل از پتانسیل LJ کلاسیک و پتانسیل کوانتومی FH وجود ندارد. نتیجه یکسانی توسط عباسپور و کوهرشادی [29] برای پتانسیل شبه HFD به دست آمده است. بنابراین معادلات (46-3)a و (46-3)b به همراه پتانسیل کوانتومی FH برای محاسبه خواص سیال نئون مورد استفاده قرار گرفته است.

ارماکوا¹ [38] نشان داده است که تاثیرات کوانتومی با استفاده از پتانسیل WK تا حدود 20%-6 در RDF با استفاده از یک پتانسیل شیمیایی نئون مشارکت می کنند. از طرف دیگر تصحیحات کوانتومی WK, RDF سیال LJ کلاسیک را تغییر می دهد و معادلات (46-3)a و (46-3)b با پتانسیل WK در معادلات مکانیکی اماری نمی توانند مورد استفاده قرار گیرند. به تازگی عباسپور [39] RDF پتانسیل WK کوانتومی که با g_3 مشخص شده را به صورت تابعی از فاصله بین ذره ای کاهش یافته روی نمودار مایع-بخار نئون که در معادله زیر ارائه شده تعیین کرده است:

$$g_{3a} = 1 + (x)^{-2} \exp[-(a_3 x + b_3)] \sin[(c_3 x + d_3)] + (x)^{-2} \exp[-(q_3 x + h_3)] \cos[(k_3 x + l_3)] \quad x > 1 \quad (24-4)$$

$$g_{2b} = s_3 x^{m_3} \quad x < 1 \quad (25-4)$$

که $a_3, b_3, c_3, d_3, q_3, h_3, k_3, l_3, m_3, n_3, s_3$ پارامترهای تنظیم پذیری اند که تابعی از دما و چگالی های کاهش یافته مختلف هستند. مقادیر این پارامترهای تنظیم پذیر در مرجع [39] داده شده است.

6-4 نتایج و بحث نئون

¹ Ermakova

عبارتهای مکانیک آماری (معادلات (۱-۴) تا (۳-۴)) برای محاسبه فشار کاهش یافته ($P^* = P\sigma^3/\varepsilon$) و انرژی داخلی کاهش یافته ($E^* = E/\varepsilon$) و حد فرکانس بالای کشیدگی برشی کاهش یافته ($G_\infty^* = G_\infty\sigma^3/\varepsilon$) سیال نئون با استفاده از پتانسیل LJ کلاسیک (معادله ۲۱-۴) و معادله RDF مرسلی به صورت زیر مورد استفاده قرار گرفته است:

$$P^* = \rho^* T^* - \frac{2\pi\rho^{*2}}{3} \left[\int_0^1 x^3 \frac{\partial U_{class}^*}{\partial x} g_{2a} dx + \int_1^\infty x^3 \frac{\partial U_{class}^*}{\partial x} g_{2b} dx \right] \quad (26-4)$$

$$E^* = \frac{3}{2} T^* + 2\pi\rho^* \left[\int_0^1 x^2 U_{class}^* g_{2a} dx + \int_1^\infty x^2 U_{class}^* g_{2b} dx \right] \quad (27-4)$$

$$G_\infty^* = \rho^* T^* + \frac{2\pi\rho^{*2}}{15} \left[\int_0^1 \frac{\partial}{\partial x} \left(x^4 \frac{\partial U_{class}^*}{\partial x} \right) g_{2a} dx + \int_1^\infty \frac{\partial}{\partial x} \left(x^4 \frac{\partial U_{class}^*}{\partial x} \right) g_{2b} dx \right] \quad (28-4)$$

نتایج سیال نئون با استفاده از پتانسیل LJ با مقادیر تجربی [40] در سه دانسیته و دمای کاهش یافته مختلف در شکلهای (۵-۴) تا (۷-۴) مورد مقایسه قرار گرفته است. نتایج تصحیح شده کوانتومی نئون با استفاده از پتانسیل FH همچنین با استفاده از معادلات (۲۶-۴) تا (۲۸-۴) به وسیله جایگزین سازی U_{class}^* با U_{FH}^* مورد محاسبه قرار گرفته است.

همانطور که شکلهای (۵-۴) و (۶-۴) نشان می دهند، پتانسیل کوانتومی FH نتایج انرژی و فشار را برای رسیدن به تطابق بهتر با تجربه مخصوصاً در دماهای پایین جایکه اثرات کوانتومی بیشتر است را افزایش داده است. بر طبق شکل (7-4) پتانسیل FH کوانتومی حد فرکانس بالای کشیدگی برشی نئون سیال را افزایش داده است. همچنین نشان داده شده است که مقادیر ما با استفاده از پتانسیل LJ کلاسیک در تطابق خوبی با

زوانگریگ و موانتاین [15] هستند. آنها مقادیر حد فرکانس بالای کشیدگی برشی را با استفاده از پتانسیل LJ کلاسیک جدول بندی کرده اند.

همچنین نتایج تصحیح شده کوانتومی روی منحنی تعادل مایع- بخار نئون با استفاده از پتانسیل WK با استفاده از معادلات (۲۶-۴) تا (۲۸-۴) با جانشین سازی U_{class}^* و g_2 با U_{WK}^* و g_3 (به ترتیب) مورد استفاده قرار گرفتند و در شکل (۸-۴) ارائه شدند. ما همچنین نتایجی را که با پتانسیل کوانتومی FH به دست آمده است را مورد مقایسه قرار دادیم. همانطور که شکل (۸-۴) نشان می دهد هر دو پتانسیل WK و FH مقادیر فشار و انرژی را افزایش دادند.

اگر چه پتانسیل کوانتومی WK تاثیر بهتری روی انرژی دو ذره‌های برای نزدیک تر ساختن آنها به تجربه دارد اما مقادیر فشار بهتر نمی شود. این ممکن است ناشی از این حقیقت باشد که تاثیرات کوانتومی به طور کامل به همراه پتانسیل موثر WK باز تولید نمی شود. [26,38]

برطبق شکل (۲۸-۴) پتانسیل کوانتومی FH حد فرکانس بالای کشیدگی برشی را افزایش داده اما پتانسیل WK نتایج دو ذره ای را کاهش داده است. همچنین نشان داده می شود که مقادیر مورد استفاده ما با پتانسیل LJ کلاسیکی در تطابق خوبی با مقادیر بامداد [2] هستند. آنها یک عبارت ساده برای G_{∞} سیال LJ کلاسیک در دماها و چگالی های مختلف گزارش کرده اند.

۷-۴ نتیجه گیری

فشار، انرژی داخلی و حد فرکانس بالای کشیدگی برشی با استفاده از فرمولهای مکانیک اماری با استفاده از پتانسیلهای LJ و شبه HFD دو ذره ای برای اتم ارگون و نئون محاسبه شده است. RDF های مورد نیاز ازدو عبارتی که به تازگی تعیین شده مورد استفاده قرار گرفته اند . همچنین شبیه سازی های دینامیک مولکولی برای محاسبه عبارتی برای RDF سیال شبه HFD در گستره $0.5 \leq T^* \leq 5.1$ و $0.35 \leq \rho^* \leq 1.1$ به کار رفته اند.

برای در نظر گرفتن اثرات چند ذره ای در سیستم شبه HFD ، پتانسیلهای سه ذره ای گیوزمن [9] ، وانگ و سادوس [10] و هاوسچایلد و پراسنیتز [8] به همراه پتانسیل دو ذره ای بدون نیاز به پتانسیلهای سه ذره ای پیچیده مورد محاسبه قرار گرفت. نتایج نشان داد که پتانسیل سه ذره ای هاوسچایلد و پراسنیتز اثر بهتری روی نتایج فشار نسبت به پتانسیلهای سه ذره ای دیگر برای رسیدن به تطابق بهتر با تجربه دارد. همچنین نشان داده شده است که اگر چه پتانسیلهای سه ذره ای گیوزمن و وانگ و سادوس تاثیرات کوچکی روی انرژی دو ذره ای دارند اما پتانسیل سه ذره ای گیوزمن مقادیر را در دانسیته های بالاتر جایکه اثرات سه ذره ای بیشتر است بهبود می بخشد . ما همچنین تاثیرات سه ذره ای را روی حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیال ارگون بررسی کرده ایم و نتیجه گرفته ایم که تنها پتانسیل سه ذره ای هاوسچایلد و پراسنیتز مقادیر دو ذره ای را تغییر می دهند. تاثیرات کوانتومی برای سیستم LJ با استفاده از پتانسیلهای WK و FH مورد بررسی قرار گرفته اند . نتایج نشان داد که هر دو پتانسیل کوانتومی WK و FH مقادیر فشار و انرژی را افزایش می دهند.

اگر چه پتانسیل کوانتومی WK اثر بهتری روی نتایج انرژی دو ذره ای به منظور نزدیکتر ساختن آنها به تجربه دارد اما مقادیر فشار را نمی تواند بهبود ببخشد . این ممکن است به این دلیل باشد که اثرات کوانتومی به طور کامل با پتانسل موثر FH به دست نمی آیند. همچنین نشان داده شده است که پتانسیل کوانتومی FH حد فرکانس بالای کشیدگی برشی را افزایش داده است اما پتانسیل FH نتایج دو ذره ای را کاهش می دهد .

جدول (1-4) پارامترهای پتانسیل ارگون و نئون استفاده شده در این تحقیق

Potential	Parameters
HFD-like [23,24,26,27] (Two-body and Three-body)	$\sigma(\text{\AA}) = 3.7565$ $\delta(\text{\AA}) = 4.2073$ $\varepsilon/k \text{ (K)} = 143.224$ $A^* = 99744.4$ $\alpha^* = 11.9196$ $C_6^* = 0.651991$ $C_8^* = 3.68594$ $C_{10}^* = -2.99307$ $D = 1.36$ $v \text{ (kJ/mol. \AA}^9\text{)} = 4414.5252$ $s = 0.9993$ $\alpha = 0.26$ $\rho_c \text{ (kg/m}^3\text{)} = 535.599$
LJ [4]	$\sigma(\text{\AA}) = 2.789$ $\varepsilon/k \text{ (K)} = 36.82$

جدول (2-4) مقادیر پارامترهای معادلات (17-4) و (16-4)

T^*	ρ^*	s_1	m_1	n_1	a_1	b_1	c_1	d_1	q_1	h_1	k_1	l_1
0.5	0.35	7.4316	-7.3848	7.8645	2.9835	-15.3179	1.9341	7.6327	2.6501	-13.5186	7.9034	-143.9304
	0.40	6.7245	-7.2978	7.7827	-0.5073	-0.1905	-25.4162	123.7550	1.1055	-2.4832	364.0549	-345.4928
	0.45	6.2598	-7.4091	7.8777	-0.6052	0.0491	20.8245	70.7119	1.0329	-2.3385	369.5060	-352.0744
	0.50	5.7906	-7.5032	7.9613	-0.6903	0.2177	16.8773	90.8825	0.9855	-2.2105	369.7521	-352.8087
	0.55	5.2343	-7.3725	7.8466	-0.7303	-0.1485	7.5672	140.4861	0.9786	-2.1012	370.1910	-354.4460
	0.60	4.8958	-7.4333	7.9001	0.9569	-2.0188	373.4796	-268.2106	-0.7340	-1.0961	2.4856	437.3905
	0.65	4.7228	-7.3545	7.8258	-0.7512	-1.3646	1.5987	171.7854	0.9190	-1.9247	375.5419	-360.9250
	0.70	4.2418	-7.3541	7.8319	-0.6435	-1.4384	1.3019	173.2913	0.9472	-1.8572	374.5585	-361.5479
	0.75	4.1073	-7.3768	7.8482	-0.6435	-1.4384	1.3019	173.2913	0.9472	-1.8572	374.5585	-361.5479
	0.80	3.8430	-7.4484	7.9145	16.7897	-21.6936	20.0014	-19.2495	-0.0587	0.2056	400.5894	-399.2392
	0.85	3.6016	-7.2878	7.7717	18.2881	-20.3331	376.1089	-365.7596	0.0014	0.1015	404.1624	-410.4006
	0.90	3.4240	-7.2527	7.7408	10.1404	-10.9086	811.3812	-775.0768	0.0618	-0.0163	409.5919	-426.4378
0.95	2.9472	-7.0832	7.6050	3.9687	-3.8843	755.2234	-683.3059	0.2836	-0.3740	404.3898	-428.5400	
1.00	3.0339	-7.1748	7.6794	3.8907	-3.8324	756.7258	-679.8116	0.2388	-0.3650	407.5297	-429.0822	
1.05	3.1150	-7.4010	7.8722	3.8743	-3.8902	744.7546	-659.7114	0.1934	-0.3523	411.4088	-430.4561	
1.10	3.2827	-7.4371	7.8853	4.0073	-4.1200	739.5608	-645.3449	0.1481	-0.3507	418.3759	-434.4096	
0.7	0.35	4.6399	-6.4938	6.9705	-0.3503	-0.1882	32.3474	17.2244	1.2350	-2.1228	347.7230	-700.9367
	0.40	4.3537	-6.5375	7.0100	-0.4293	0.0775	27.9222	27.0323	1.2158	-2.0439	346.5962	-698.8784
	0.45	4.1498	-6.5755	7.0403	-0.5117	0.3360	26.8713	31.8596	1.1319	-1.9103	353.2059	-346.5321
	0.50	3.6466	-6.4741	6.9456	-0.5097	0.7149	24.7436	56.4692	1.1364	-1.7763	348.9941	-342.0939
	0.55	3.4802	-6.5833	7.0485	-0.5975	0.9302	19.5967	76.6162	1.1111	-1.7093	349.3248	-342.5482
	0.60	3.3095	-6.5793	7.0438	-0.7036	0.7587	9.2103	131.9864	1.1326	-1.6986	352.0261	-345.1157
	0.65	3.1314	-6.6383	7.0971	-0.6438	0.8156	8.8063	134.6919	1.0912	-1.6171	354.4861	-348.0182
	0.70	2.9550	-6.7318	7.1797	-0.5532	-0.4294	2.1455	169.3024	1.0906	-1.5541	355.3806	-349.5737

ادامہ جدول (۲-۴)

	0.75	2.7554	-6.6612	7.1161	16.3343	-20.3151	31.1282	-30.0947	0.1719	0.2917	386.4939	-399.0831
	0.80	2.6113	-6.5394	7.0104	5.7706	-5.7750	731.4281	-674.3942	0.4134	-0.2013	400.9584	-434.3482
	0.85	2.5191	-6.6519	7.1099	3.3189	-2.9283	705.9470	-624.2355	0.5126	-0.4826	400.3995	-431.9571
	0.90	2.5691	-6.6809	7.1307	3.0812	-2.6308	710.0503	-621.4710	0.4916	-0.5186	401.9977	-430.6834
	0.95	2.6415	-6.8030	7.2315	3.0390	-2.6327	710.4045	-615.5206	0.4377	-0.5054	404.7727	-430.5577
	1.00	2.7210	-6.8934	7.2993	3.0422	-2.7066	694.1189	-591.2669	0.3953	-0.5047	408.9028	-432.3595
	1.05	2.8305	-7.0308	7.4121	3.3119	-3.0860	702.9483	-597.7949	0.3137	-0.4452	413.4807	-433.3745
	1.10	2.9331	-7.2152	7.5553	3.3721	-3.2492	699.0892	-587.4526	0.2427	-0.3997	420.5462	-437.7760
0.9	0.35	2.5326	-5.9860	6.4576	12.6431	-17.1999	116.1741	-160.1254	15.4658	-19.8568	101.8734	-495.0981
	0.40	2.6191	-6.0670	6.5307	1.5097	-1.7273	333.6295	-248.7035	-0.4372	0.7151	9.7943	401.4267
	0.45	2.5070	-6.1448	6.5968	-0.3750	-0.5436	2.7441	167.9410	1.4613	-1.6303	328.9846	-331.5604
	0.50	2.4154	-6.1202	6.5739	-0.3628	-0.7112	1.5853	172.3681	1.4663	-1.6164	337.7621	-342.6969
	0.55	2.3004	-6.0884	6.5456	13.1735	-17.2165	19.9005	-19.0938	0.3240	0.6167	373.6964	-395.5419
	0.60	2.2818	-6.1695	6.6125	14.2486	-18.2908	19.7493	-18.9885	0.3633	0.4293	376.4236	-399.3392
	0.65	2.2727	-6.1564	6.6028	7.7163	-7.6993	678.9777	-633.4956	0.6009	-0.1304	393.1486	-434.9014
	0.70	2.2305	-6.1281	6.5739	4.5710	-4.1303	696.8373	-628.0693	0.7252	-0.4532	393.4049	-434.6006
	0.75	2.2476	-6.2310	6.6619	3.8785	-3.3127	700.9210	-627.1125	0.6895	-0.4868	393.8435	-430.3327
	0.80	2.2840	-6.2234	6.6500	3.3256	-2.6267	711.3053	-627.2935	0.7233	-0.6105	393.9505	-426.4749
	0.85	2.3353	-6.3226	6.7306	3.0159	-2.3421	705.2407	-613.3567	0.6330	-0.5566	397.1203	-427.1955
	0.90	2.3761	-6.4687	6.8502	2.5521	-1.8320	694.3838	-589.5598	0.6464	-0.6531	401.8855	-429.6634
	0.95	2.4731	-6.5035	6.8765	2.8308	-2.2562	689.5561	-582.2587	0.5374	-0.5618	405.0424	-430.2796
	1.00	2.5431	-6.6500	6.9907	2.7915	-2.2599	691.2285	-578.8021	0.4779	-0.5384	409.9162	-432.2381
	1.05	2.6188	-6.9139	7.2102	2.9460	-2.5180	690.8549	-212.4013	0.4204	-0.5191	415.0757	-434.2856
	1.10	2.7093	-7.0589	7.3206	3.3065	-2.9947	701.3366	-942.8946	0.3154	-0.4047	419.7164	-435.4462
1.1	0.35	2.1094	-5.7009	6.1578	4.1901	-9.0073	5.3442	-5.4545	2.1619	-2.9804	229.0664	-175.5353
	0.40	2.0615	-5.7394	6.1863	4.8956	-8.8842	5.9333	-5.6035	1.3097	-1.1195	294.0453	-268.6811
	0.45	2.0475	-5.8079	6.2446	11.3926	-15.5790	11.7868	-11.1765	0.4404	0.8275	365.1410	-393.0539

ادامه جدول (٤-٢)

	0.50	2.0500	-5.7694	6.2068	11.3703	-15.5427	10.3644	-9.7937	0.4999	0.5276	357.3831	-375.9323
	0.55	2.0608	-5.7965	6.2314	10.1982	-10.4984	529.0353	-500.8483	0.6956	0.0840	381.7593	-424.6819
	0.60	2.0284	-5.9073	6.3225	6.2710	-5.9608	667.8703	-615.0998	0.8097	-0.2955	393.3769	-443.9825
	0.65	2.0269	-6.0163	6.4130	4.8933	-4.2963	687.6152	-621.4628	0.8971	-0.5292	389.1295	-432.5734
	0.70	2.0722	-5.9020	6.3090	3.3046	-2.4768	699.4862	-613.6911	0.9129	-0.7045	395.4414	-436.4370
	0.75	2.1042	-6.0390	6.4262	3.0981	-2.1883	692.2634	-599.3142	0.8952	-0.7163	392.1139	-427.6819
	0.80	2.1542	-6.0645	6.4410	2.9941	-2.1476	684.0456	-584.9113	0.7806	-0.6234	395.1965	-428.2295
	0.85	2.2008	-6.1800	6.5364	2.5753	-1.6490	694.8002	-589.4937	0.7677	-0.6751	396.6494	-425.7251
	0.90	2.2550	-6.3394	6.6660	2.9332	-2.1628	682.8601	-571.9061	0.6831	-0.6112	400.9004	-427.7020
	0.95	2.3280	-6.4330	6.7381	2.7281	-2.0032	685.1904	-568.5161	0.6330	-0.6146	406.4142	-430.2408
	1.00	2.4163	-6.5162	6.8011	2.8289	-2.1908	682.8374	-562.7285	0.5486	-0.5509	410.6828	-431.8541
	1.05	2.4820	-6.6851	6.9311	2.9663	-2.3770	702.5208	-941.7550	0.4634	-0.4814	414.8107	-431.8220
	1.10	2.5570	-6.9332	7.1325	2.9249	-2.3890	704.0237	-578.5849	0.4148	-0.4676	418.9746	-432.5065
1.3	0.35	1.9139	-5.3099	5.7686	9.8644	-14.0701	8.4791	-7.9419	0.6185	0.8932	357.4170	-388.9316
	0.40	1.8921	-5.5552	5.9821	0.4959	0.1331	-0.0615	17.1509	1.8380	-1.6164	323.2003	-339.9016
	0.45	1.8884	-5.6566	6.0680	12.0223	-14.9743	35.1719	-33.4380	0.6092	0.6262	366.9053	-400.5776
	0.50	5.7906	-7.5032	7.9613	-0.6903	0.2177	16.8773	90.8825	0.9855	-2.2105	369.7521	-352.8087
	0.55	1.8923	-5.7232	6.1135	6.6519	-6.2790	599.0772	-544.7115	0.9548	-0.2961	392.2475	-446.7190
	0.60	4.8958	-7.4333	7.9001	0.9569	-2.0188	373.4796	-268.2106	-0.7340	-1.0961	2.4856	437.3905
	0.65	1.9338	-5.8159	6.1896	3.8446	-2.8792	698.6045	-617.8265	1.0809	-0.7441	387.0814	-428.4093
	0.70	1.9573	-5.7841	6.1528	3.6783	-2.6231	703.6043	-619.7724	1.0470	-0.7410	384.8107	-421.2497
	0.75	2.0104	-5.8250	6.1842	2.7479	-1.5953	697.9272	-600.8283	0.9873	-0.7739	390.3806	-424.2507
	0.80	2.0494	-6.0180	6.3467	2.7610	-1.6742	697.6197	-597.9302	0.8486	-0.6491	393.9271	-424.8777
	0.85	2.0935	-6.0572	6.3700	2.4127	-1.2992	685.7152	-572.5250	0.8578	-0.7327	396.0786	-423.6847
	0.90	2.1710	-6.1341	6.4308	2.4623	-1.4667	694.0407	-579.7314	0.7618	-0.6568	400.7680	-425.5993
	0.95	2.2272	-6.2938	6.5576	2.6325	-1.7337	688.0331	-569.3995	0.6539	-0.5646	405.0417	-427.6633
	1.00	2.2960	-6.4637	6.6904	2.8753	-2.0717	695.3789	-572.0810	0.6030	-0.5512	409.4887	-428.1389
	1.05	2.3614	-6.6463	6.8350	2.6617	-1.8954	698.0074	-569.5921	0.5480	-0.5373	414.1667	-429.7759

ادامه جدول (٢-٤)

	1.10	2.4433	-6.7847	6.9378	2.9879	-2.3601	696.3555	-565.7206	0.4545	-0.4474	419.6547	-432.2061
1.5	0.35	1.8053	-5.2980	5.7180	7.6087	-11.5949	7.2703	-6.7398	0.7782	0.5604	309.5217	-300.1764
	0.40	1.7775	-5.3913	5.7924	9.1199	-12.9500	9.0913	-8.4679	0.7538	0.6023	338.8346	-350.7437
	0.45	1.7711	-5.5493	5.9287	7.9171	-7.8374	477.5884	-437.6992	0.8332	0.2903	397.5978	-464.0507
	0.50	1.7789	-5.5419	5.9161	6.8628	-6.5513	553.3068	-502.2656	0.9642	-0.0788	390.0246	-452.6317
	0.55	1.8150	-5.4889	5.8674	5.7043	-5.0002	680.4775	-616.2569	1.1739	-0.6134	392.1139	-446.4864
	0.60	1.8288	-5.6325	5.9835	4.6082	-3.7786	652.5392	-576.3431	1.0580	-0.5469	391.1409	-441.4128
	0.65	1.8606	-5.6398	5.9883	3.2457	-2.1480	654.1293	-552.0960	1.1828	-0.8654	392.1665	-436.0516
	0.70	1.8750	-5.7915	6.1112	3.6246	-2.4521	706.0592	-618.5862	1.0440	-0.6702	387.1547	-423.6210
	0.75	1.9318	-5.7035	6.0285	2.7586	-1.5124	704.7043	-603.1555	1.0161	-0.7444	389.1056	-421.8862
	0.80	1.9687	-5.8659	6.1652	2.7778	-1.5885	689.0964	-581.1376	0.9276	-0.6930	391.5362	-422.0008
	0.85	2.0404	-5.9947	6.2692	2.4995	-1.3099	699.8510	-584.4151	0.8969	-0.7095	396.0706	-422.0978
	0.90	2.0903	-6.1127	6.3600	3.1046	-2.1400	673.7983	-553.7223	0.7764	-0.5954	401.4402	-426.3347
	0.95	2.1388	-6.2147	6.4369	2.6842	-1.7310	682.7300	-556.4830	0.7122	-0.5941	406.4315	-428.5692
	1.00	2.2131	-6.3424	6.5336	2.6711	-1.7272	700.0393	-572.2143	0.6573	-0.5684	410.5768	-428.0923
	1.05	2.2767	-6.4610	6.6216	2.6786	-1.7968	713.8571	-583.9180	0.5990	-0.5297	412.5388	-426.2121
	1.10	2.3433	-6.7861	6.8863	2.9697	-2.1815	707.4388	-574.3360	0.5085	-0.4553	418.5363	-428.9373
1.7	0.35	1.7099	-5.2013	5.6014	10.8933	-13.9143	24.7551	-23.2685	0.5478	1.2017	357.5843	-401.4853
	0.40	1.6803	-5.3680	5.7350	9.3752	-12.9681	9.0532	-8.3969	1.0692	0.1760	344.4023	-367.8264
	0.45	1.6937	-5.3473	5.7120	8.4075	-8.0952	555.4482	-514.0692	1.1882	-0.2857	386.1397	-449.4020
	0.50	1.7167	-5.3523	5.7146	8.2752	-7.9421	560.3561	-520.4802	0.9600	0.0006	388.4403	-443.4326
	0.55	1.7393	-5.3668	5.7226	3.1656	-1.8937	648.7784	-544.1760	1.6368	-1.3087	388.9891	-440.1144
	0.60	1.7629	-5.5056	5.8401	4.8383	-3.6921	742.2132	-672.2905	1.2750	-0.7748	382.2322	-425.1448
	0.65	1.7976	-5.5251	5.8506	3.1443	-1.8570	693.7670	-597.1260	1.2216	-0.8279	388.4402	-429.5256
	0.70	1.8469	-5.5666	5.8796	3.1270	-1.8539	680.7982	-576.2964	1.0997	-0.7429	388.8120	-425.3340
	0.75	1.8872	-5.6225	5.9204	2.6999	-1.4176	665.0057	-549.3345	1.0747	-0.7894	392.2712	-425.6877
	0.80	1.9179	-5.7181	5.9950	2.8721	-1.6383	669.4145	-549.6666	0.9759	-0.7141	394.8097	-425.2342

	0.85	1.9760	-5.7795	6.0375	2.9044	-1.6836	709.6575	-596.7012	0.8783	-0.6144	396.4372	-422.2229
	0.90	2.0272	-5.8778	6.1146	2.5316	-1.3579	678.4663	-554.5412	0.8361	-0.6370	402.2531	-426.0449
	0.95	2.0931	-6.1036	6.2968	2.5890	-1.4884	691.9310	-560.3859	0.8041	-0.6543	405.5073	-424.7002
	1.00	2.1445	-6.2354	6.3952	2.8927	-1.8875	699.5037	-570.3340	0.6583	-0.5036	410.7072	-427.3664
	1.05	2.2082	-6.4072	6.5273	2.5968	-1.5732	704.9447	-569.6800	0.6420	-0.5320	414.1366	-426.5915
	1.10	2.2737	-6.5696	6.6522	2.7905	-1.9161	701.7051	-920.2945	0.5645	-0.4942	419.2425	-429.0544
1.9	0.35	1.6233	-5.0758	5.4566	10.6982	-12.3177	79.2123	-74.4090	0.9542	0.5682	361.3916	-406.8375
	0.40	1.6262	-5.2511	5.6060	8.7151	-8.5116	451.1105	-412.5802	1.1989	0.0019	389.2493	-459.2190
	0.45	1.6387	-5.2646	5.6108	13.9780	-16.4167	36.9079	-35.2169	1.1814	-0.1320	358.0100	-398.4289
	0.50	1.6664	-5.3494	5.6789	4.8043	-3.8781	624.5064	-540.8202	1.5176	-0.9575	393.2587	-455.5495
	0.55	1.6892	-5.3271	5.6541	3.2657	-2.0741	634.7310	-531.6644	1.4770	-1.0355	392.5225	-446.6743
	0.60	1.7100	-5.4527	5.7564	4.2235	-2.8277	709.0854	-624.9030	1.3533	-0.8444	381.5302	-423.5060
	0.65	1.7458	-5.4833	5.7805	4.2582	-2.8271	730.0030	-649.5597	1.2605	-0.7651	378.7499	-414.7692
	0.70	1.7940	-5.4556	5.7518	2.6615	-1.1963	662.7704	-545.5481	1.2300	-0.8953	386.1780	-421.4456
	0.75	1.8159	-5.6017	5.8646	2.5971	-1.0951	661.2003	-541.4891	1.1459	-0.8277	386.3512	-417.1788
	0.80	1.8826	-5.6401	5.8923	2.6173	-1.2149	669.8284	-546.6480	1.0800	-0.7970	394.6187	-423.0412
	0.85	1.9223	-5.7357	5.9656	2.5448	-1.2473	670.8762	-541.7274	0.9574	-0.7096	398.9549	-425.3099
	0.90	1.9831	-5.8666	6.0672	2.6589	-1.4498	679.5677	-547.1974	0.9317	-0.7171	400.2381	-421.9061
	0.95	2.0381	-6.0229	6.1905	2.6693	-1.4451	689.9978	-557.5905	0.8068	-0.6062	403.4233	-421.4562
	1.00	2.0920	-6.1479	6.2822	2.3738	-1.2231	696.7118	-197.7055	0.7860	-0.6440	410.8482	-425.6038
	1.05	2.1397	-6.3948	6.4761	2.5401	-1.3341	724.3321	-587.7240	0.6917	-0.5393	412.6358	-422.9774
	1.10	2.2096	-6.5742	6.6138	2.9094	-1.9581	703.8247	-199.5667	0.6036	-0.4877	420.4183	-428.9560
2.1	0.35	1.5731	-5.0584	5.4132	4.9663	-4.5013	560.9864	-484.6211	2.1206	-1.5831	410.1170	-506.7959
	0.40	1.5968	-5.0244	5.3817	5.3299	-5.0378	487.3495	-421.2507	1.5863	-0.6360	436.5657	-544.8032
	0.45	1.6103	-5.0999	5.4395	6.9536	-6.0938	604.2835	-543.6413	1.5653	-0.7748	382.5439	-444.2414
	0.50	1.6154	-5.2875	5.5949	3.3027	-1.6158	673.2562	-572.2798	1.8631	-1.3901	370.5921	-416.8607
	0.55	1.6658	-5.1886	5.5103	1.7458	-0.0165	591.5053	-436.3421	1.8842	-1.6404	385.0341	-426.6991

ادامه جدول (٤-٢)

	0.60	1.6880	-5.3000	5.5984	3.5802	-2.1388	664.5761	-562.1245	1.4535	-0.9753	385.1269	-428.8078
	0.65	1.7110	-5.3367	5.6220	3.4591	-1.9781	667.1185	-563.4967	1.2954	-0.8128	382.5958	-420.4950
	0.70	1.7542	-5.4271	5.6942	2.6765	-1.0646	652.8703	-528.6384	1.3335	-0.9747	387.4645	-420.6998
	0.75	1.7945	-5.4827	5.7328	2.4858	-0.9299	668.9377	-545.2428	1.1665	-0.8143	390.1800	-420.8350
	0.80	1.8387	-5.5984	5.8237	2.5731	-1.0277	707.3267	-589.6008	1.0865	-0.7406	394.2227	-421.2538
	0.85	1.8999	-5.6114	5.8287	2.6880	-1.2625	706.5010	-584.1094	0.9648	-0.6444	396.3634	-420.3206
	0.90	1.9287	-5.8854	6.0475	2.2337	-0.7570	704.0863	-571.0516	0.9743	-0.7133	398.7407	-418.0748
	0.95	1.9823	-5.9028	6.0491	2.4475	-1.1383	689.3051	-548.1789	0.8858	-0.6764	405.5574	-423.1464
	1.00	2.0428	-6.0569	6.1693	2.7771	-1.5705	713.9632	-577.9843	0.7712	-0.5505	409.4255	-423.3272
	1.05	2.0913	-6.2985	6.3581	2.3241	-1.0148	725.5891	-585.9530	0.7237	-0.5433	412.5951	-421.6136
	1.10	2.1483	-6.4973	6.5097	2.7189	-1.6264	714.9495	-569.1531	0.6502	-0.4931	419.6368	-426.6571
2.3	0.35	1.5055	-4.9660	5.3068	2.5209	-1.4754	550.4954	-370.0496	3.1506	-3.1696	413.0705	-474.2760
	0.40	1.5407	-5.0525	5.3745	3.4908	-3.0391	541.9734	-425.5584	2.2814	-2.1296	429.9361	-523.7963
	0.45	1.5625	-5.0679	5.3848	5.3416	-4.4021	564.4087	-486.0146	1.5769	-0.7906	390.8510	-458.5443
	0.50	1.5948	-5.1613	5.4632	5.6770	-4.4146	659.2029	-579.5120	1.6864	-1.0278	387.9045	-444.1904
	0.55	1.6085	-5.3008	5.5736	4.2685	-2.9611	659.1554	-571.0184	1.4933	-0.8687	387.5345	-439.9223
	0.60	1.6515	-5.1909	5.4765	3.5830	-2.1579	659.7513	-559.9313	1.3758	-0.8313	387.9614	-432.7718
	0.65	1.6767	-5.2816	5.5476	3.8235	-2.0653	765.7136	-669.1230	1.3843	-0.8753	382.1255	-417.5071
	0.70	1.7144	-5.4148	5.6530	4.4290	-2.8545	741.1380	-651.0772	1.2652	-0.7213	380.2450	-411.1291
	0.75	1.7546	-5.4115	5.6446	2.5095	-0.8260	688.4493	-567.5988	1.2135	-0.8196	388.2397	-417.1655
	0.80	1.7945	-5.6144	5.8076	2.5097	-0.9261	679.5317	-550.8005	1.1302	-0.7699	396.5248	-423.5771
	0.85	1.8443	-5.5956	5.7819	2.8725	-1.3321	713.5739	-594.3726	1.0131	-0.6423	393.6367	-415.9329
	0.90	1.8967	-5.7119	5.8689	2.7487	-1.2203	714.7711	-946.9045	0.9526	-0.6274	398.0249	-416.2511
	0.95	1.9369	-5.9649	6.0708	2.3318	-0.8255	721.8089	-587.7809	0.8796	-0.6001	404.1732	-419.6360
	1.00	1.9940	-6.1140	6.1830	2.4796	-1.1865	697.7177	-552.5517	0.8515	-0.6264	411.5007	-424.7062
	1.05	2.0437	-6.1935	6.2363	2.6190	-1.3302	719.3716	-578.3905	0.7185	-0.4912	413.7189	-423.1878
	1.10	2.0983	-6.4387	6.4280	2.3968	-1.1530	714.3436	-564.2248	0.6674	-0.4904	419.2709	-425.3682

ادامه جدول (٤-٢)

2.5	0.35	1.4779	-5.0276	5.3363	8.2187	-8.4307	183.1389	-169.7944	1.2185	0.3725	323.5811	-346.0745
	0.40	1.5021	-5.0303	5.3332	2.4932	-0.4739	626.0100	-487.3551	2.5202	-2.1145	373.3049	-425.3383
	0.45	1.5184	-5.0376	5.3326	1.2285	1.6753	700.6217	-580.1616	2.4076	-1.9129	349.8375	-387.9610
	0.50	1.5571	-5.1248	5.4088	2.9348	-1.3950	593.9929	-458.5243	2.0604	-1.6524	393.8131	-447.3504
	0.55	1.5935	-5.1108	5.3898	4.6595	-3.1700	718.6794	-635.7091	1.5873	-0.9511	384.4070	-431.8381
	0.60	1.6305	-5.1396	5.4070	4.2032	-2.6455	681.2171	-587.7997	1.3623	-0.7289	379.7246	-421.1318
	0.65	1.6538	-5.2698	5.5121	2.6596	-0.6932	694.0530	-573.6084	1.4944	-1.0100	379.4648	-413.5362
	0.70	1.6910	-5.3140	5.5425	2.8785	-1.0491	718.4384	-605.5114	1.2982	-0.8038	385.3032	-417.5099
	0.75	1.7311	-5.3964	5.6012	2.2577	-0.3813	700.6922	-572.8799	1.2857	-0.8677	389.2166	-416.5212
	0.80	1.7822	-5.4454	5.6394	2.0555	-0.3389	661.2827	-513.1681	1.2508	-0.9307	393.1366	-416.8637
	0.85	1.8084	-5.6315	5.7828	2.3280	-0.7432	666.5714	-521.6547	1.1559	-0.8392	398.2028	-420.2785
	0.90	1.8616	-5.7045	5.8340	2.8076	-1.2622	713.5097	-945.7896	0.9568	-0.5849	397.3806	-415.0701
	0.95	1.9076	-5.8054	5.9070	2.2963	-0.7613	698.6063	-555.7210	0.9152	-0.6195	404.6629	-419.9212
	1.00	1.9543	-5.9923	6.0514	2.6180	-1.1207	730.8191	-2395.6215	0.8353	-0.5377	407.2073	-417.9596
	1.05	2.0038	-6.2050	6.2154	2.3925	-0.9924	708.4168	-562.4187	0.7581	-0.5004	414.3218	-422.9365
	1.10	2.0528	-6.3381	6.3120	2.4440	-1.0541	735.5946	-588.8147	0.7034	-0.4779	418.5071	-422.6660
2.7	0.35	1.4470	-4.9331	5.2267	11.7941	-14.1137	23.8359	-22.1353	1.4962	-0.1666	352.0232	-405.9493
	0.40	1.4940	-4.7906	5.1126	9.6196	-8.7742	493.9565	-454.7034	1.7000	-0.6551	361.3744	-416.4757
	0.45	1.5148	-4.9809	5.2668	4.5804	-3.5544	539.1163	-444.6943	1.8165	-1.0756	395.9447	-468.3193
	0.50	1.5351	-5.0409	5.3114	4.9832	-3.4157	694.2806	-615.6443	1.7660	-1.0541	375.8943	-424.5663
	0.55	1.5571	-5.0835	5.3425	8.3821	-7.0956	577.8118	-513.6383	1.4116	-0.5607	372.6411	-413.5216
	0.60	1.6026	-5.1032	5.3538	3.4934	-1.8508	678.3331	-568.2537	1.5628	-0.9774	385.4653	-428.0448
	0.65	1.6183	-5.1959	5.4240	1.8458	0.3483	675.3739	-549.0053	1.6408	-1.1519	375.4208	-406.7372
	0.70	1.6658	-5.2461	5.4619	3.5349	-1.7754	731.4757	-629.0730	1.2756	-0.6910	384.2900	-416.1632
	0.75	1.7075	-5.3463	5.5364	2.5993	-0.8600	670.2371	-530.6089	1.3622	-0.9430	388.3286	-414.9480
	0.80	1.7469	-5.4249	5.5936	3.0056	-1.3458	715.7712	-591.0524	1.1731	-0.7166	392.8810	-417.3397
	0.85	1.7995	-5.5038	5.6532	2.6194	-0.9296	717.4634	-588.7166	1.0996	-0.6797	397.3147	-417.7989
	0.90	1.8305	-5.6569	5.7676	2.6778	-1.0763	701.1020	-566.5041	1.0067	-0.6144	402.1350	-420.5596

ادامه جدول (٤-٢)

	0.95	1.8777	-5.8054	5.8795	2.6093	-1.0496	722.9306	-583.4069	0.9693	-0.6205	403.1048	-416.3857
	1.00	1.9274	-5.9311	5.9758	2.5095	-1.0486	719.8732	-579.2215	0.8377	-0.5139	408.7228	-420.1528
	1.05	1.9744	-6.1058	6.1064	2.5238	-1.1214	706.8716	-553.1114	0.8310	-0.5696	414.0525	-421.6948
	1.10	2.0171	-6.2967	6.2492	2.4177	-0.9838	743.6752	-596.5267	0.7051	-0.4370	418.3479	-421.9111
2.9	0.35	1.4360	-4.8750	5.1610	2.5827	-1.5980	523.1616	-348.5881	2.8810	-2.7856	399.3736	-462.8902
	0.40	1.4588	-4.9044	5.1836	13.2608	-14.8530	59.7364	-56.1340	1.2833	0.1524	364.5236	-415.2150
	0.45	1.4744	-4.9021	5.1762	5.9310	-4.7669	555.6782	-478.8136	1.6616	-0.7227	374.2715	-438.5188
	0.50	1.5172	-4.9782	5.2421	7.8470	-6.7802	636.0839	-580.9482	1.4341	-0.4293	384.0507	-438.3388
	0.55	1.5456	-5.0063	5.2566	3.6503	-1.7784	728.6715	-636.7227	1.6520	-0.9826	375.4999	-418.7621
	0.60	1.5669	-5.0897	5.3201	3.6858	-2.0534	617.3088	-501.5427	1.5165	-0.8774	379.9246	-422.0095
	0.65	1.6157	-5.1236	5.3440	2.6858	-0.7318	704.7056	-591.5561	1.5123	-0.9350	385.0555	-419.9257
	0.70	1.6430	-5.2968	5.4811	2.5225	-0.8381	614.8378	-472.8067	1.3860	-0.9098	391.9683	-426.1481
	0.75	1.6769	-5.2877	5.4647	2.7277	-0.9254	683.3497	-558.6854	1.2508	-0.7301	387.9764	-416.5366
	0.80	1.7244	-5.3173	5.4822	2.7526	-0.9422	694.3513	-566.6225	1.2139	-0.7233	389.9784	-413.6369
	0.85	1.7544	-5.5051	5.6267	2.3700	-0.5536	708.2579	-571.9710	1.1593	-0.7242	393.8550	-413.2461
	0.90	1.8043	-5.6330	5.7248	2.4140	-0.6354	734.6684	-602.1043	1.0535	-0.6309	398.1182	-413.8672
	0.95	1.8595	-5.7673	5.8276	2.5695	-0.9213	704.9707	-558.3674	1.0286	-0.6711	405.0610	-417.5742
	1.00	1.8951	-5.8833	5.9089	2.6447	-1.1708	697.6794	-545.4693	0.9135	-0.5919	410.1993	-421.0487
	1.05	1.9359	-6.1043	6.0776	2.5648	-1.0848	716.6569	-560.2709	0.8603	-0.5666	414.1563	-420.9740
	1.10	1.9871	-6.2064	6.1486	2.6853	-1.2860	725.6126	-572.6220	0.7651	-0.4801	419.4500	-422.7691
3.1	0.35	1.4266	-4.8073	5.0902	7.0745	-6.2861	453.5446	-396.5309	1.7377	-0.4995	400.0921	-483.0145
	0.40	1.4423	-4.8093	5.0867	1.5388	1.5121	703.1696	-578.2308	2.4328	-1.7968	350.1854	-392.0009
	0.45	1.4787	-4.8517	5.1208	5.1647	-3.9039	532.6052	-432.8439	1.8614	-1.0599	385.1650	-448.2981
	0.50	1.4987	-4.9143	5.1649	4.4382	-2.9512	646.4484	-548.7914	1.8426	-1.1055	390.9261	-447.7089
	0.55	1.5156	-4.9462	5.1841	2.2940	0.1961	760.1549	-654.9036	1.8485	-1.2056	368.3476	-403.7686
	0.60	1.5631	-4.9768	5.2077	4.6383	-2.9031	684.8621	-587.8311	1.5667	-0.8493	375.3439	-414.4483
	0.65	1.5889	-5.0896	5.2927	3.6014	-1.8710	689.3327	-575.2352	1.4412	-0.7997	391.5014	-429.8046

	0.70	1.6134	-5.1648	5.3469	3.1355	-1.2034	686.9210	-572.7610	1.3433	-0.7356	384.8596	-415.9973
	0.75	1.6587	-5.2129	5.3780	2.7892	-0.9840	665.7308	-531.8232	1.3064	-0.7779	389.1339	-416.9607
	0.80	1.7077	-5.3114	5.4575	3.1716	-1.3835	687.5007	-558.2144	1.2324	-0.7131	393.1013	-416.6599
	0.85	1.7385	-5.4510	5.5615	2.7817	-1.0823	695.1427	-550.5341	1.2007	-0.7564	397.4239	-417.5829
	0.90	1.7810	-5.5413	5.6271	2.2198	-0.3982	706.1914	-555.8896	1.1611	-0.7654	399.3268	-414.5019
	0.95	1.8254	-5.6766	5.7279	2.3342	-0.6506	712.0588	-563.5090	1.0467	-0.6731	404.6277	-416.9889
	1.00	1.8716	-5.8323	5.8455	2.4626	-0.7769	729.8713	-581.3866	0.9548	-0.5972	409.2518	-417.5691
	1.05	1.9051	-6.0283	5.9911	2.4051	-0.8108	718.1060	-564.1475	0.8628	-0.5293	413.9273	-420.0699
	1.10	1.9506	-6.2264	6.1374	2.4522	-0.9108	737.0847	-578.2698	0.8299	-0.5304	417.1414	-418.4654
3.3	0.35	1.3812	-4.7566	5.0238	3.9452	-1.0641	863.3864	-800.1547	2.8321	-2.0685	344.3692	-389.2116
	0.40	1.4181	-4.8259	5.0829	2.1636	-0.7039	527.5968	-313.2375	3.1898	-2.9759	405.3384	-451.8312
	0.45	1.4576	-4.7528	5.0222	3.0932	-1.6410	546.5844	-406.9411	2.0788	-1.5417	388.6916	-448.7004
	0.50	1.4777	-4.8022	5.0544	3.2888	-1.8175	576.3618	-448.5653	1.8533	-1.2228	393.8220	-451.9626
	0.55	1.5172	-4.8834	5.1195	3.4707	-2.0113	619.0848	-498.6055	1.7011	-1.0412	398.2111	-451.8338
	0.60	1.5315	-4.9929	5.2011	2.9380	-0.7362	637.6389	-499.3768	1.8306	-1.2283	372.7418	-406.4680
	0.65	1.5563	-5.0954	5.2778	2.8091	-0.7437	692.3683	-568.8401	1.5915	-0.9708	381.9748	-415.2681
	0.70	1.6057	-5.1303	5.3030	2.6793	-0.4976	728.9350	-614.0636	1.4571	-0.8503	381.3589	-408.9961
	0.75	1.6440	-5.1920	5.3429	3.2666	-1.3272	718.0793	-595.8752	1.3338	-0.7297	384.7075	-409.8095
	0.80	1.6768	-5.3053	5.4271	2.5640	-0.6606	670.7272	-524.2843	1.2923	-0.7976	394.6352	-416.6220
	0.85	1.7264	-5.3680	5.4748	2.4555	-0.6190	707.8340	-565.0245	1.2448	-0.7737	397.5958	-416.4861
	0.90	1.7544	-5.5183	5.5850	2.2553	-0.3455	700.8214	-551.4568	1.1460	-0.7113	399.2436	-413.8769
	0.95	1.7990	-5.6653	5.6974	2.3664	-0.5871	714.9675	-1286.2453	1.0493	-0.6371	404.6779	-416.0770
	1.00	1.8411	-5.7761	5.7737	2.4816	-0.7625	712.4492	-561.6942	0.9190	-0.5222	409.9050	-418.9634
	1.05	1.8820	-5.9838	5.9321	2.3578	-0.6026	740.0066	-589.2192	0.8841	-0.5063	411.8843	-415.8400
	1.10	1.9248	-6.1167	6.0257	2.3963	-0.8013	737.7763	-578.1238	0.8627	-0.5443	418.9948	-419.9561
3.5	0.35	1.3848	-4.7075	4.9709	7.5058	-6.9537	438.0350	-398.0717	1.2553	0.5428	401.5330	-494.6022
	0.40	1.4128	-4.7575	5.0113	11.1034	-10.8397	270.1715	-249.1088	1.3161	0.2030	375.0582	-431.1829

ادامه جدول (٤-٢)

	0.45	1.4298	-4.7814	5.0271	4.7873	-2.6709	605.7865	-496.1217	2.0571	-1.2647	349.1739	-392.1817
	0.50	1.4580	-4.8520	5.0764	3.4345	-1.3084	681.0228	-572.2523	1.9069	-1.1691	371.4632	-416.8231
	0.55	1.4767	-4.8845	5.0975	4.4287	-2.4870	631.1328	-539.7963	1.6412	-0.8081	367.9516	-408.4647
	0.60	1.5148	-5.0144	5.1991	2.0479	0.2567	693.3920	-561.2255	1.7057	-1.0761	383.7813	-419.8256
	0.65	1.5600	-4.9283	5.1218	3.1486	-1.3086	617.7953	-462.5463	1.7257	-1.1688	384.2495	-417.4785
	0.70	1.5792	-5.1149	5.2691	2.6234	-0.3250	694.0378	-196.1552	1.5721	-0.9766	376.7494	-402.3766
	0.75	1.6203	-5.2071	5.3364	1.8870	0.4801	723.4853	-584.7499	1.5505	-0.9936	385.8129	-407.3694
	0.80	1.6638	-5.2414	5.3601	3.1129	-1.0687	750.5033	-634.9697	1.1723	-0.5599	391.9757	-413.6014
	0.85	1.6959	-5.3848	5.4661	3.1068	-1.3090	694.9085	-555.9939	1.1533	-0.6162	397.6368	-417.7850
	0.90	1.7397	-5.4490	5.5089	2.5041	-0.6397	699.8185	-549.4329	1.1412	-0.6682	400.2015	-415.1315
	0.95	1.7769	-5.6194	5.6365	2.4039	-0.4545	752.3910	-613.2137	1.0213	-0.5370	402.0339	-412.1583
	1.00	1.8194	-5.7582	5.7409	2.5106	-0.7566	715.2156	-561.6248	0.9734	-0.5634	411.9016	-420.1411
	1.05	1.8578	-5.9337	5.8703	2.3077	-0.5018	739.7168	-585.9681	0.9202	-0.5292	411.7559	-414.9870
	1.10	1.9004	-6.0999	5.9902	2.4278	-0.7337	740.5248	-583.2055	0.8288	-0.4560	418.4104	-418.8277
3.7	0.35	1.3711	-4.6308	4.8935	2.8064	-0.5820	621.8678	-477.3508	2.9700	-2.3730	372.9885	-429.9507
	0.40	1.3992	-4.6002	4.8624	14.2115	-15.2382	90.4177	-86.0166	1.5437	-0.1210	371.5915	-422.4112
	0.45	1.4154	-4.7864	5.0127	7.9567	-6.5268	564.6883	-498.0973	1.9673	-0.8985	375.8447	-431.4872
	0.50	1.4453	-4.7851	5.0041	6.1268	-3.5302	1055.5767	-1011.0104	1.9218	-1.1182	347.9410	-381.8820
	0.55	1.4641	-4.9018	5.0926	1.6166	1.4213	726.5666	-597.4026	1.9048	-1.1874	352.8260	-383.8318
	0.60	1.5040	-4.9681	5.1457	5.4619	-3.5970	732.4849	-639.1028	1.5306	-0.6958	380.8124	-418.4607
	0.65	1.5443	-4.9517	5.1250	2.1019	0.4249	659.7956	-511.9314	1.7616	-1.1474	374.3170	-400.5495
	0.70	1.5809	-5.0248	5.1798	1.9749	0.5407	702.9576	-550.3196	1.6803	-1.1083	377.2296	-399.9443
	0.75	1.6007	-5.1682	5.2867	2.9342	-0.7031	731.0472	-954.6025	1.4699	-0.8770	385.3695	-408.0565
	0.80	3.8430	-7.4484	7.9145	16.7897	-21.6936	20.0014	-19.2495	-0.0587	0.2056	400.5894	-399.2392
	0.85	1.6867	-5.3083	5.3883	2.8928	-0.9434	691.8210	-183.7565	1.2233	-0.7086	395.0408	-412.3298
	0.90	1.7218	-5.4407	5.4860	2.3754	-0.4026	722.8550	-210.9026	1.2110	-0.7278	397.8440	-411.0259
	0.95	1.7543	-5.6101	5.6114	2.1839	-0.0534	761.3704	-621.7236	1.0969	-0.5954	401.9566	-410.6840
	1.00	1.7976	-5.7437	5.7084	2.6206	-0.9440	705.1799	-544.6993	1.0088	-0.5967	412.5326	-420.8376

ادامه جدول (٢-٤)

	1.05	1.8369	-5.8456	5.7781	2.3052	-0.4443	746.0572	-587.9847	0.9570	-0.5507	411.0967	-413.3139
	1.10	1.8751	-6.0750	5.9489	2.2605	-0.4684	742.8407	-583.2023	0.8390	-0.4415	418.8225	-418.6095
3.9	0.35	1.3436	-4.7382	4.9631	7.6820	-6.5829	548.0812	-488.9450	2.2249	-1.0695	396.2874	-475.1242
	0.40	1.3859	-4.6462	4.8851	6.1319	-5.1287	282.7498	-240.7111	1.2771	0.4295	355.8335	-394.7860
	0.45	1.4166	-4.6735	4.9039	1.4840	2.1088	669.8426	-509.5147	2.4491	-1.6944	341.4039	-373.9835
	0.50	1.4491	-4.7133	4.9326	1.2535	1.8399	626.1232	-439.8219	2.5465	-1.9039	363.2196	-397.4393
	0.55	1.4645	-4.7863	4.9828	4.8010	-2.5526	749.2411	-639.8153	1.8757	-1.0787	374.8738	-412.9325
	0.60	1.5014	-4.8269	5.0163	5.2173	-3.3824	776.5329	-692.4528	1.3890	-0.5122	383.5044	-424.0398
	0.65	1.5219	-4.9449	5.1057	3.6118	-1.4629	768.8652	-668.3216	1.4768	-0.6949	376.2850	-408.2710
	0.70	1.5493	-5.0450	5.1762	3.2451	-1.1061	679.6262	-543.1100	1.5240	-0.8603	381.3181	-408.8205
	0.75	1.5962	-5.0740	5.1965	2.8179	-0.7562	684.5049	-539.6859	1.4391	-0.8470	391.0187	-414.9605
	0.80	1.6313	-5.2068	5.2992	3.7485	-1.7787	682.9339	-543.5195	1.3446	-0.7306	387.8876	-407.8002
	0.85	1.6598	-5.2907	5.3516	2.5779	-0.7635	669.1375	-502.0285	1.3820	-0.9069	401.9076	-419.4757
	0.90	1.6959	-5.4536	5.4767	3.0333	-1.1820	698.3989	-553.0894	1.1394	-0.5943	402.9611	-418.2317
	0.95	1.7402	-5.5536	5.5467	2.6313	-0.7635	719.6643	-562.6688	1.1429	-0.6719	404.4666	-414.4604
	1.00	1.7749	-5.7434	5.6896	2.6449	-0.7358	743.4630	-589.6307	1.0363	-0.5585	407.7364	-413.4156
	1.05	1.8121	-5.8536	5.7633	2.4054	-0.4778	756.3689	-598.2939	0.9736	-0.5396	411.6886	-413.2058
	1.10	1.8551	-6.0167	5.8840	2.1596	-0.3127	751.9198	-589.8056	0.8681	-0.4598	418.0209	-416.8125
4.1	0.35	1.3440	-4.6306	4.8645	7.5645	-6.5456	521.7939	-477.1292	1.5477	-0.0893	383.2345	-455.6924
	0.40	1.3624	-4.6290	4.8550	7.6420	-6.8210	331.7262	-292.5925	1.1512	0.7024	375.2747	-430.5457
	0.45	1.3875	-4.6553	4.8719	6.3086	-4.6983	707.4975	-638.9747	1.8475	-0.8308	380.0502	-437.5859
	0.50	1.3615	-4.5980	4.7892	5.7308	-3.8156	742.5047	-663.4667	1.8976	-0.9743	380.0465	-429.6161
	0.55	1.4494	-4.7194	4.9164	7.5360	-5.5026	791.0279	-721.0273	1.8429	-0.9259	367.3249	-404.8418
	0.60	1.4847	-4.8577	5.0237	3.5517	-1.2356	737.6127	-627.3878	1.7449	-0.9500	379.4749	-416.3203
	0.65	1.5083	-4.8735	5.0292	3.2279	-0.8981	761.9297	-650.2122	1.5579	-0.7792	377.6881	-407.5383
	0.70	1.5439	-4.9966	5.1242	1.8816	0.4795	657.5840	-494.6256	1.6948	-1.0856	388.8297	-414.9048
	0.75	1.5751	-5.0917	5.1926	2.2752	-0.0127	725.0233	-586.3529	1.4634	-0.8205	391.5134	-415.0704

ادامه جدول (٤-٢)

	0.80	1.6111	-5.1858	5.2617	3.1761	-0.9670	726.5017	-953.5831	1.3443	-0.6932	386.2826	-404.6709
	0.85	1.6432	-5.2721	5.3219	2.5405	-0.4496	726.1191	-222.3790	1.2597	-0.6775	397.5700	-414.0851
	0.90	1.6823	-5.4087	5.4239	3.0201	-1.1029	695.6554	-543.0440	1.1883	-0.6430	400.6178	-413.7279
	0.95	1.7173	-5.5535	5.5291	2.1055	0.1304	744.8892	-236.5610	1.1488	-0.6258	401.6370	-409.0414
	1.00	1.7615	-5.6223	5.5727	2.3143	-0.5442	690.3874	-517.3349	1.0970	-0.6741	415.2609	-422.4417
	1.05	1.7953	-5.8396	5.7353	2.6699	-0.8085	753.5331	-956.9336	0.9418	-0.4631	413.8811	-416.0624
	1.10	1.8301	-6.0057	5.8556	2.3001	-0.4821	749.8772	-585.7374	0.9039	-0.4741	418.5996	-417.2127
4.3	0.35	1.3333	-4.4834	4.7306	0.1007	4.6536	748.9384	-619.5937	2.8846	-2.0127	335.8269	-376.7437
	0.40	1.3549	-4.5641	4.7899	4.6121	-3.8734	407.9766	-352.6841	0.9380	1.2877	441.0788	-557.9053
	0.45	1.3878	-4.6317	4.8429	11.6442	-10.1992	556.7047	-521.4347	1.9091	-0.7673	352.6743	-393.4509
	0.50	1.4060	-4.7272	4.9142	11.6442	-10.1992	556.7047	-521.4347	1.9091	-0.7673	352.6743	-393.4509
	0.55	1.4444	-4.7188	4.9012	6.4101	-4.6725	528.6498	-444.3250	1.4997	-0.4015	365.6976	-404.2301
	0.60	1.4671	-4.8192	4.9777	5.1031	-2.6980	756.9753	-652.6611	1.7551	-0.9030	363.0265	-394.4866
	0.65	1.4993	-4.8770	5.0172	3.6923	-1.5286	739.9560	-621.5119	1.5769	-0.7986	384.4336	-417.1164
	0.70	1.5267	-4.9980	5.1089	3.1706	-0.8680	708.3573	-572.4039	1.5537	-0.8227	382.0925	-409.2522
	0.75	1.5602	-5.0816	5.1676	3.8506	-1.7189	689.1185	-548.3359	1.5357	-0.8516	388.9230	-411.9493
	0.80	1.5992	-5.1681	5.2321	2.4441	-0.3401	661.4207	-501.4616	1.4307	-0.8364	394.4810	-414.3940
	0.85	1.6115	-5.1750	5.2003	2.6856	-0.4877	753.5992	-611.5762	1.3007	-0.6739	394.1754	-408.4118
	0.90	1.6718	-5.3697	5.3759	3.0820	-0.9734	753.8242	-612.0971	1.1584	-0.5548	399.3306	-411.4572
	0.95	1.7083	-5.4563	5.4346	2.2110	-0.0770	718.6567	-196.3511	1.1729	-0.6457	405.5694	-413.8384
	1.00	1.7353	-5.6959	5.6132	2.5582	-0.6704	714.0420	-554.2371	1.0561	-0.5497	410.7134	-417.0030
	1.05	1.7755	-5.8210	5.7033	2.4540	-0.5372	728.0929	-562.6685	1.0242	-0.5480	413.8758	-415.4618
	1.10	1.8090	-6.0345	5.8605	2.3083	-0.4234	751.4491	-946.8626	0.9180	-0.4570	419.9266	-418.3732
4.5	0.35	1.3341	-4.4509	4.6925	2.1228	1.3711	927.6309	-867.3065	2.9229	-2.0613	342.7816	-388.2803
	0.40	1.3501	-4.5855	4.7934	15.8492	-16.9032	84.1201	-79.8971	1.7869	-0.3238	375.8100	-429.9786
	0.45	1.3773	-4.5678	4.7777	1.6606	2.0700	969.1906	-904.6371	2.3162	-1.4189	332.4399	-364.2600
	0.50	1.3882	-4.7364	4.9076	4.4995	-2.2879	672.2088	-577.0644	1.8775	-0.9133	372.4205	-416.9514

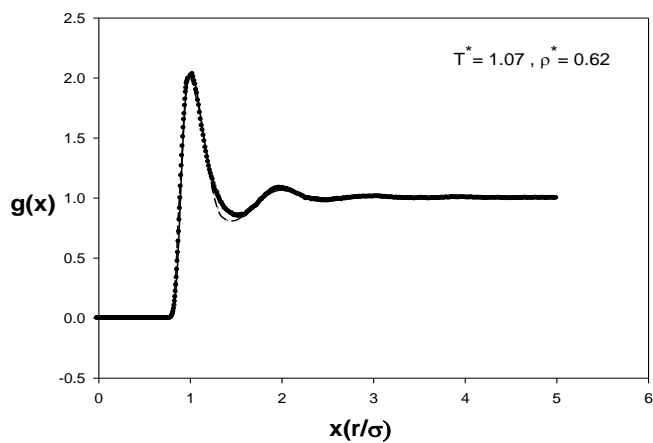
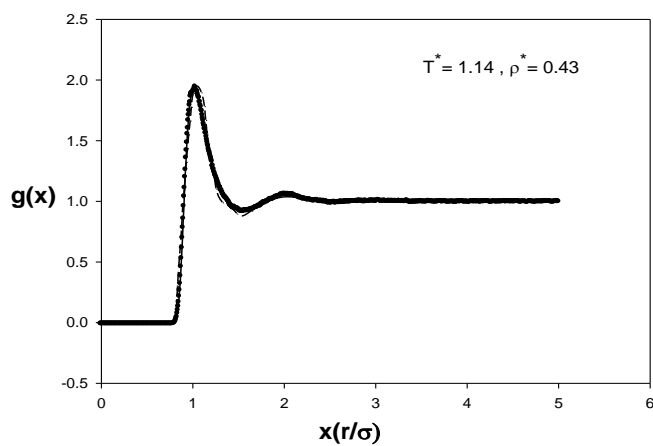
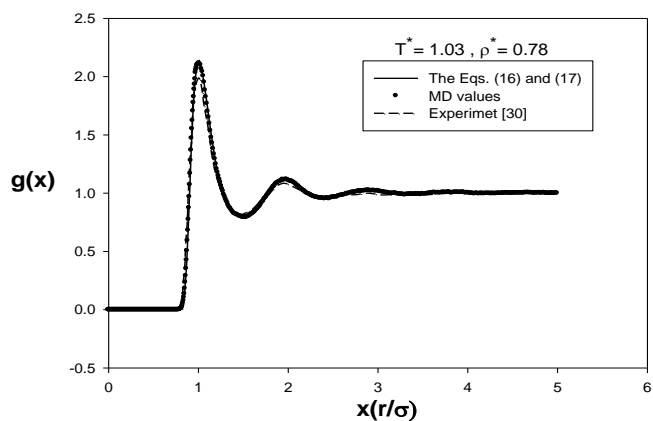
	0.55	1.4244	-4.7497	4.9126	3.6099	-1.2865	659.2059	-530.3790	1.9662	-1.1418	379.5461	-419.3957
	0.60	1.4589	-4.7915	4.9404	1.5325	1.4742	695.3790	-534.8077	2.0834	-1.3462	371.3034	-397.6916
	0.65	1.4901	-4.8806	5.0077	3.1915	-0.8353	725.3595	-595.9158	1.6607	-0.8882	378.4408	-407.5725
	0.70	1.5199	-4.9199	5.0322	3.8528	-1.5022	827.9327	-723.7100	1.4450	-0.6302	382.3629	-408.3642
	0.75	1.5508	-5.0370	5.1176	2.5534	-0.3267	659.2888	-500.4391	1.5103	-0.8637	387.2229	-409.3506
	0.80	1.5943	-5.0873	5.1519	2.3795	-0.0977	696.1219	-541.3316	1.5027	-0.8748	389.5022	-406.8314
	0.85	1.6209	-5.2249	5.2535	3.1047	-0.9120	717.7128	-573.6876	1.3151	-0.6688	396.4216	-411.9065
	0.90	1.6503	-5.3395	5.3340	3.1207	-1.0637	736.3758	-591.4095	1.1800	-0.5575	399.4977	-411.4735
	0.95	1.6886	-5.4715	5.4320	2.0396	0.1110	724.7290	-916.8470	1.2125	-0.6832	401.9473	-408.8942
	1.00	1.7238	-5.6395	5.5558	2.3848	-0.3486	748.0200	-584.1004	1.1392	-0.6259	409.6151	-413.6247
	1.05	1.7576	-5.7552	5.6335	2.1413	-0.0283	754.2149	-587.4624	1.0834	-0.5935	412.3350	-411.5584
	1.10	1.7955	-5.9199	5.7529	2.7972	-0.9800	737.4379	-929.0141	0.9218	-0.4471	420.4442	-419.1647
4.7	0.35	1.3207	-4.4487	4.6785	3.9951	-3.0663	350.6835	-292.8945	0.7798	1.8708	398.1866	-491.0963
	0.40	1.3576	-4.4856	4.7049	6.0547	-4.7202	468.0926	-379.0511	1.9586	-0.7550	393.2769	-464.9130
	0.45	1.3615	-4.5980	4.7892	4.9764	-3.6881	482.2483	-371.5916	2.1194	-1.1336	407.0432	-481.0794
	0.50	1.3882	-4.6459	4.8220	7.9776	-6.0032	750.9775	-684.4536	1.8733	-0.8192	364.7188	-406.9518
	0.55	1.4204	-4.7245	4.8814	3.4585	-1.0887	767.8671	-657.9490	1.9348	-1.0740	385.4253	-426.6693
	0.60	1.4539	-4.7793	4.9222	13.5359	-11.9209	796.5646	-757.2639	1.5168	-0.4569	366.1985	-394.9144
	0.65	1.4797	-4.8250	4.9491	3.3371	-1.0792	675.5851	-535.1857	1.7110	-0.9433	381.1628	-411.0451
	0.70	1.5135	-4.8898	4.9930	2.6378	-0.2700	660.7619	-866.0430	1.6804	-0.9590	381.0466	-405.6614
	0.75	1.5451	-5.0061	5.0805	1.9753	0.6183	723.0758	-560.1494	1.6790	-1.0020	384.1182	-401.4594
	0.80	1.5769	-5.1028	5.1494	2.4410	0.0827	772.3031	-641.6478	1.3836	-0.6622	388.0417	-404.7048
	0.85	1.6321	-5.2723	5.3071	2.6158	-0.3881	704.8247	-542.4655	1.3854	-0.7695	396.3468	-410.1613
	0.90	1.6412	-5.3228	5.3064	2.4915	-0.3164	718.0463	-563.9691	1.2932	-0.6895	402.4266	-413.4767
	0.95	1.6730	-5.4601	5.4053	2.5676	-0.5982	712.0370	-904.3234	1.1914	-0.6453	407.8198	-416.5127
	1.00	1.7098	-5.6171	5.5195	2.5890	-0.5998	732.3395	-570.2964	1.1325	-0.5934	409.3125	-413.2720
	1.05	1.7483	-5.7376	5.6067	2.4993	-0.4624	757.0194	-597.7081	1.0137	-0.4689	412.7950	-413.3179
	1.10	1.7822	-5.8906	5.7147	2.5075	-0.6276	738.7902	-566.9980	0.9930	-0.5159	422.5497	-420.4480

ادامه جدول (٤-٢)

4.9	0.35	1.3177	-4.4555	4.6726	10.5913	-8.5391	958.3616	-900.4861	3.0101	-2.0860	372.1612	-431.2751
	0.40	1.3289	-4.4624	4.6722	2.7116	0.5463	806.7132	-690.7727	2.5519	-1.6195	348.3369	-389.4337
	0.45	1.3623	-4.4906	4.6906	10.6550	-11.4638	41.8832	-37.5912	1.5546	-0.0650	345.7831	-376.3168
	0.50	1.3818	-4.5500	4.7317	3.4832	-1.4222	593.8211	-443.8454	2.1590	-1.3452	377.9338	-422.1022
	0.55	1.4060	-4.6778	4.8274	1.5142	1.7195	693.2196	-549.7407	2.0108	-1.1459	362.9219	-394.0362
	0.60	1.4430	-4.7221	4.8609	5.7139	-3.7233	715.6961	-615.9200	1.6342	-0.6635	382.2805	-419.5847
	0.65	1.4717	-4.7833	4.9019	3.4094	-1.1453	738.6808	-616.0637	1.6882	-0.8378	386.3722	-418.1845
	0.70	1.4930	-4.8801	4.9731	2.6218	-0.1699	706.4396	-560.6445	1.6603	-0.9023	382.3107	-407.3941
	0.75	1.5301	-4.9695	5.0378	2.6839	-0.2762	739.6318	-598.9411	1.6067	-0.8845	384.8934	-403.9718
	0.80	1.5619	-5.0852	5.1216	2.6671	-0.1617	803.0365	-681.6696	1.3618	-0.5955	390.7252	-408.0825
	0.85	1.5949	-5.1421	5.1559	2.5090	-0.1880	711.0733	-555.8116	1.3942	-0.7417	395.1062	-408.1999
	0.90	1.6269	-5.2759	5.2557	2.1221	0.2242	717.0699	-551.1711	1.3380	-0.7438	398.7487	-407.7860
	0.95	1.6631	-5.4096	5.3534	3.6232	-1.6628	732.8741	-578.1695	1.1728	-0.5524	403.3739	-410.9883
	1.00	1.6916	-5.5786	5.4748	2.5492	-0.4193	727.3608	-560.2354	1.1885	-0.6328	409.0930	-412.1095
	1.05	1.7269	-5.7283	5.5809	2.1607	0.0532	770.9490	-610.0189	1.0219	-0.4551	413.8339	-413.2044
	1.10	1.7585	-5.8711	5.6812	2.1683	-0.0486	771.3018	-602.0663	0.9776	-0.4587	417.9525	-413.7011
5.1	0.35	1.2931	-4.4670	4.6678	-0.0542	4.9339	547.5498	-291.7010	2.9860	-2.0234	322.1256	-356.1720
	0.40	1.3284	-4.3965	4.6057	1.5456	2.2149	792.7316	-659.7393	2.8316	-1.8869	335.7951	-370.2919
	0.45	1.3533	-4.4801	4.6729	5.6340	-4.5495	468.0685	-399.2969	1.3669	0.2837	409.2176	-490.2204
	0.50	1.3755	-4.6436	4.7959	6.0376	-4.1603	587.2000	-491.2831	1.8780	-0.8082	381.9281	-430.5131
	0.55	1.3930	-4.6814	4.8199	4.1284	-1.0423	756.5559	-631.7831	2.0288	-1.1155	361.5836	-392.4058
	0.60	1.4332	-4.7037	4.8335	3.2733	-1.2557	598.3205	-426.4500	2.0606	-1.3378	383.4998	-417.3412
	0.65	1.4631	-4.7367	4.8522	2.3045	0.2790	663.0124	-488.2719	1.9846	-1.2612	375.8759	-399.4856
	0.70	1.4904	-4.8878	4.9667	1.5991	1.2294	687.3596	-509.8450	1.8628	-1.1432	378.1702	-397.2049
	0.75	1.5187	-4.9557	5.0127	2.6020	-0.2765	675.7680	-508.7153	1.6970	-0.9997	383.6136	-402.2865
	0.80	1.5531	-5.0556	5.0874	2.0180	0.5888	738.6097	-587.8380	1.4811	-0.7686	392.2384	-408.8132
	0.85	1.5841	-5.1638	5.1634	3.1482	-0.9102	721.2582	-563.7007	1.4388	-0.7607	395.2703	-408.5112
	0.90	1.6181	-5.2732	5.2403	2.0221	0.4736	747.5958	-587.6275	1.3470	-0.7095	398.8714	-406.6171

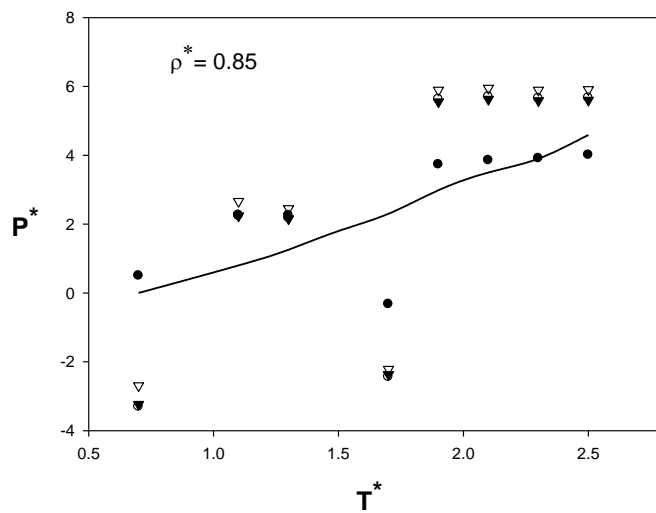
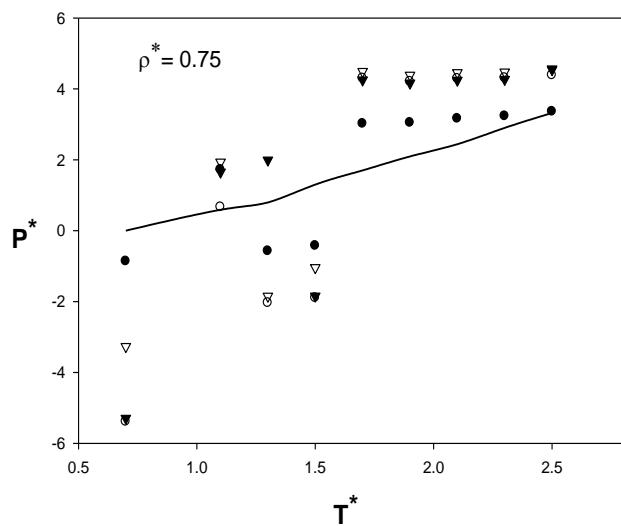
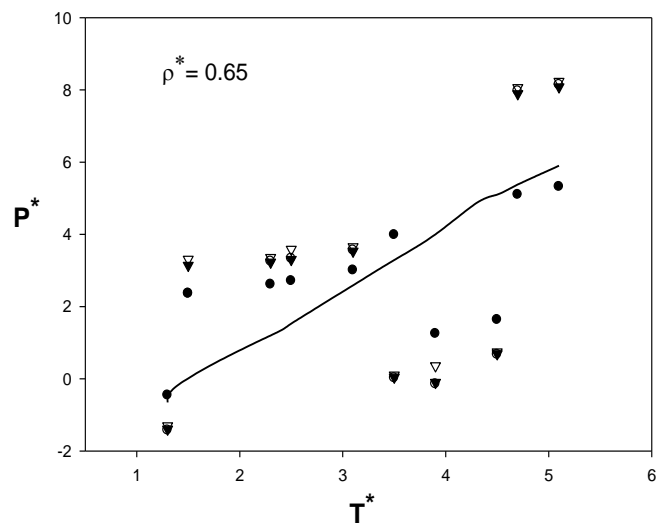
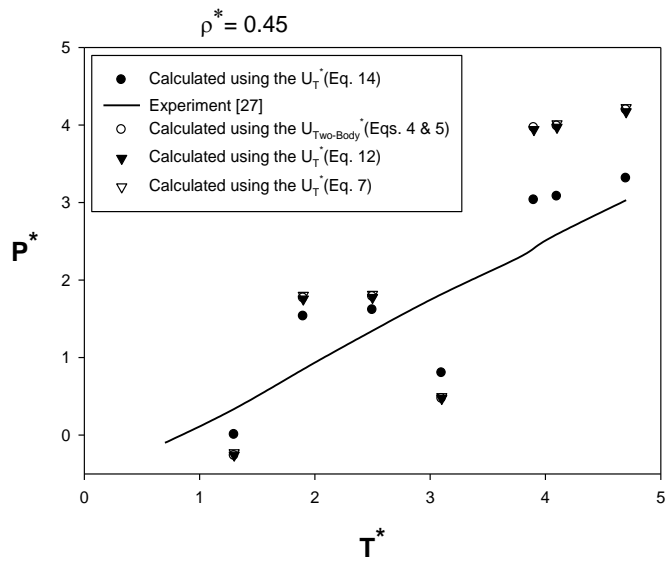
ادامه جدول (٤-٢)

0.95	1.6486	-5.3822	5.3164	2.6318	-0.3307	762.0760	-968.8637	1.2145	-0.5781	402.9188	-408.3703
1.00	1.6743	-5.6023	5.4798	2.4764	-0.3662	719.6979	-547.0421	1.1993	-0.6363	409.8245	-413.1062
1.05	1.7187	-5.6934	5.5426	2.2667	-0.1854	757.8132	-589.7893	1.0969	-0.5456	413.6591	-412.6048
1.10	1.7497	-5.8506	5.6528	2.3661	-0.3175	759.3316	-951.3129	1.0013	-0.4652	418.0355	-413.6751



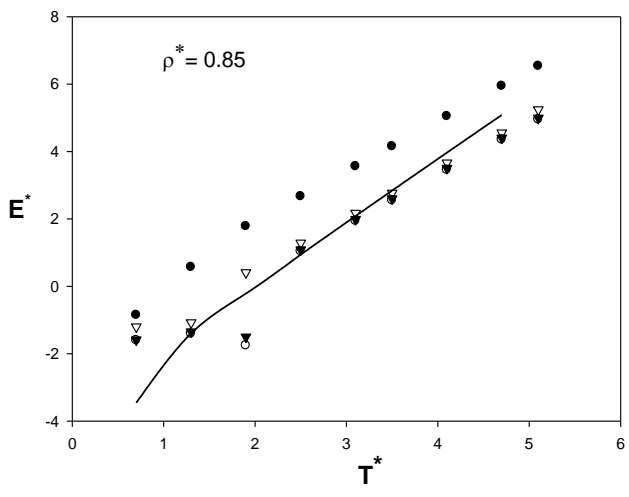
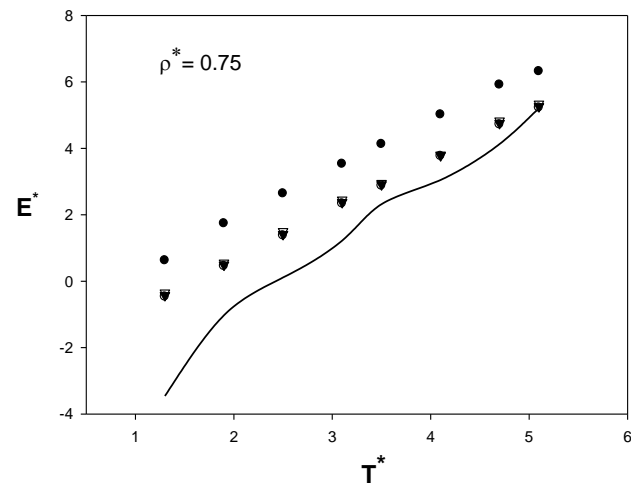
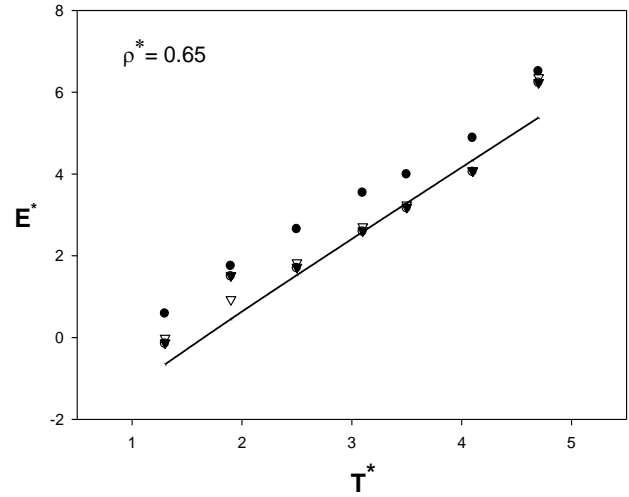
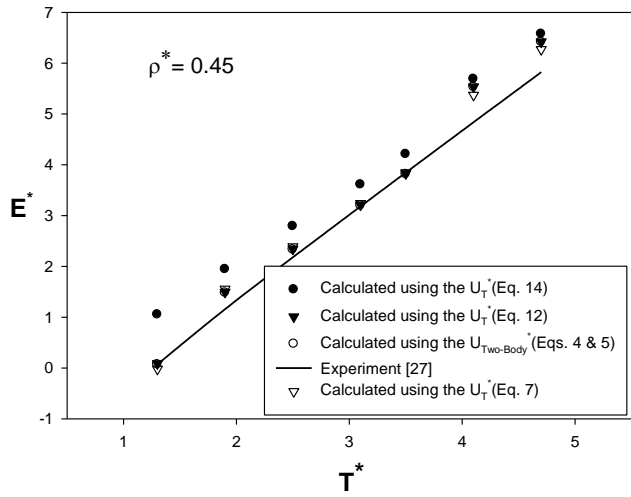
شکل (۴-۱) مقایسه بین RDF های محاسبه شده سیال ارگون با استفاده از معادلات

(۴-۱۶) و (۴-۱۷) با شبیه سازی MD و مقادیر تجربه



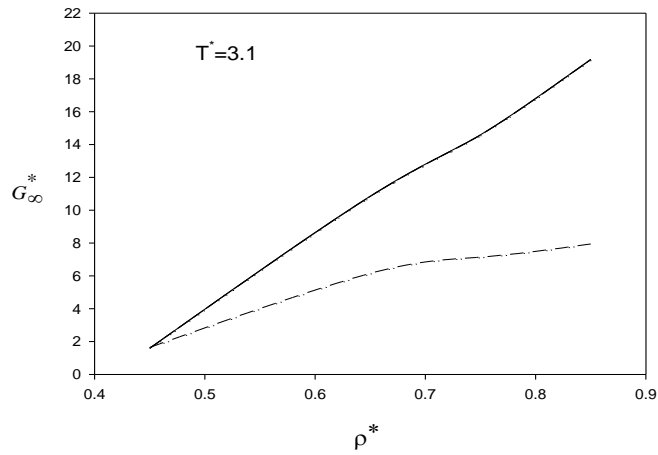
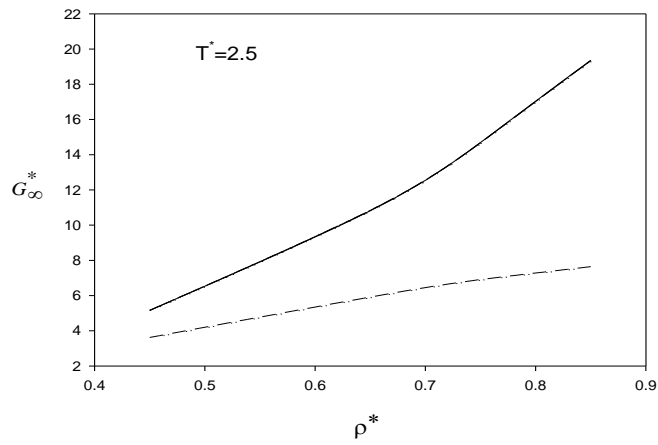
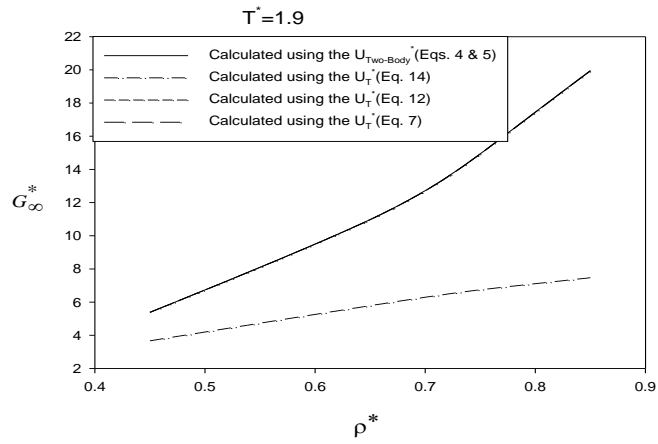
شکل (۲-۴) مقایسه بین فشار های کاهش یافته محاسبه شده سیال ارگون با استفاده از

پتانسیلهای مختلف با مقادیر تجربی

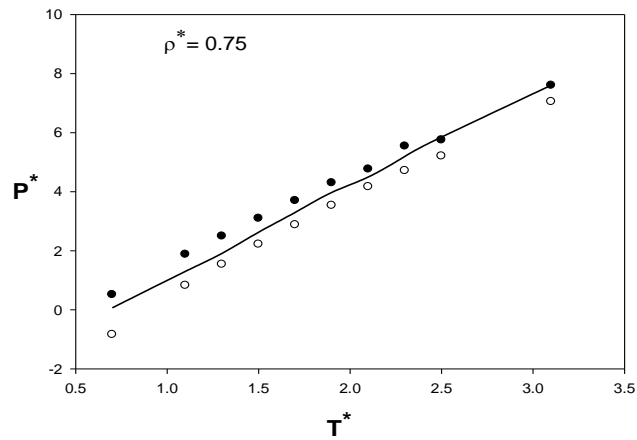
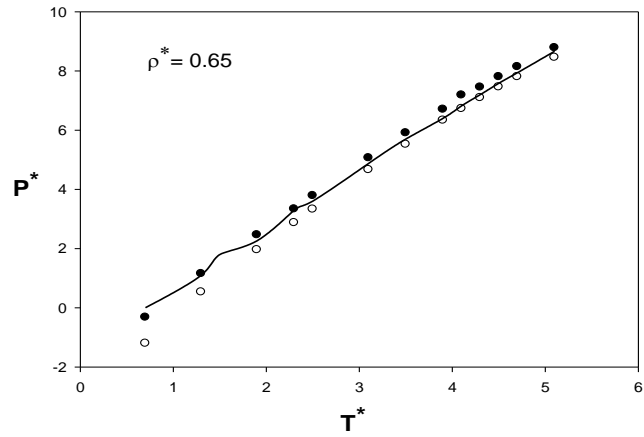
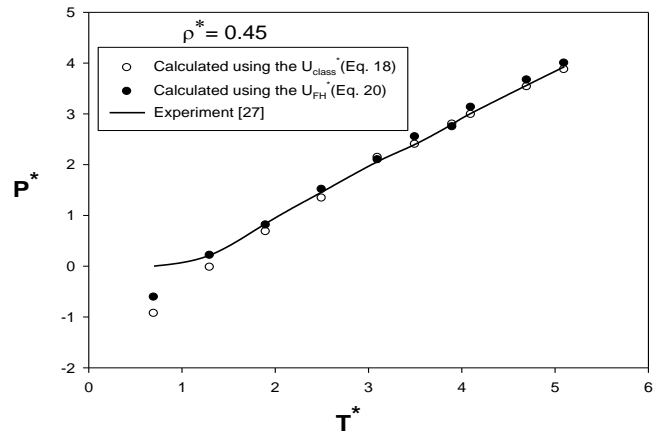


شکل (۳-۴) مقایسه بین انرژی های کاهش یافته محاسبه شده سیال ارگون با استفاده از

پتانسیلهای مختلف با مقادیر تجربی

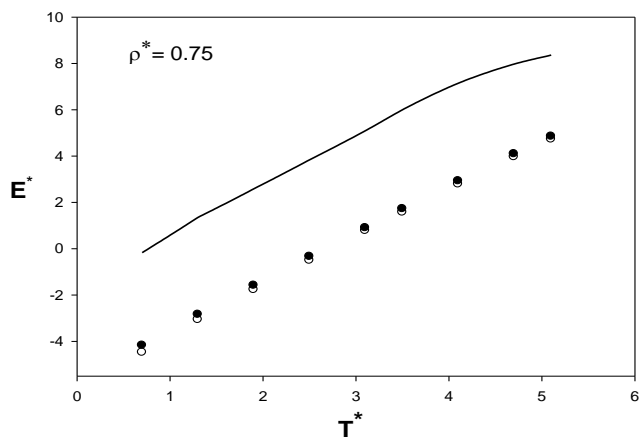
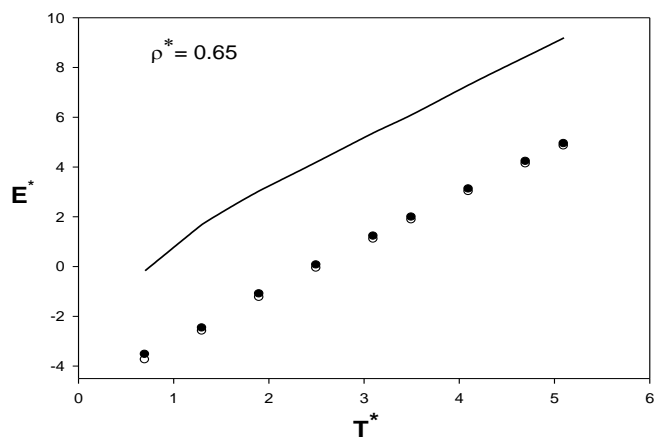
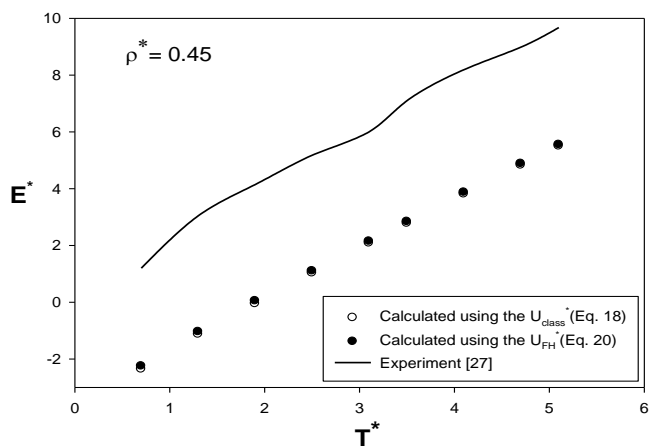


شکل (۴-۴) مقادیر محاسبه شده حد فرکانس بالای کشیدگی برشی سیال ارگون با استفاده از پتانسیلهای مختلف



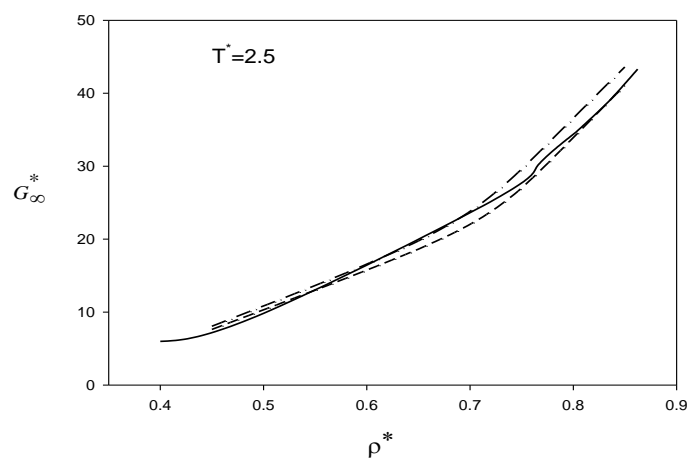
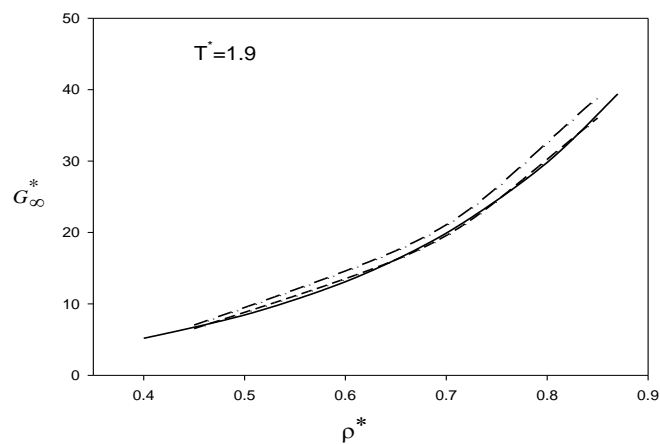
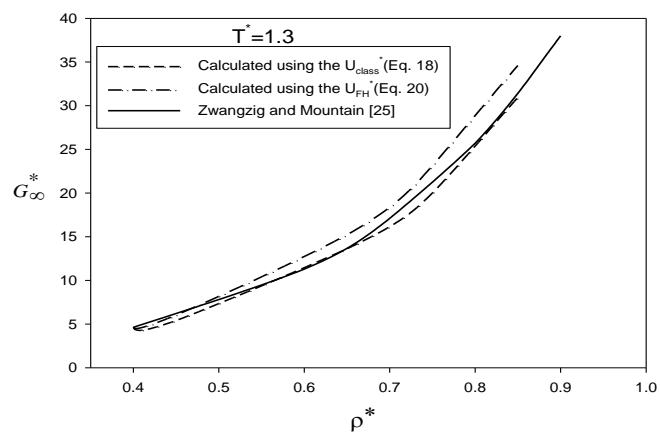
شکل (۴-۵) مقایسه بین فشارهای کاهش یافته محاسبه شده سیال نئون با استفاده از پتانسیلهای

مختلف با مقادیر تجربی



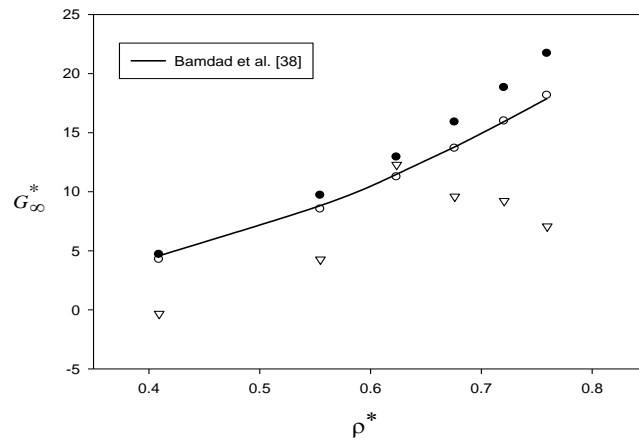
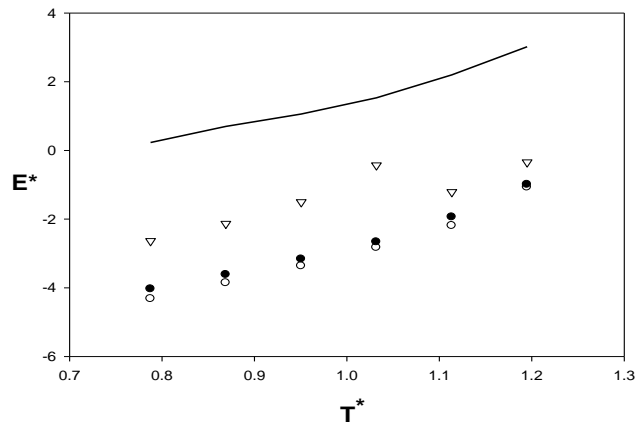
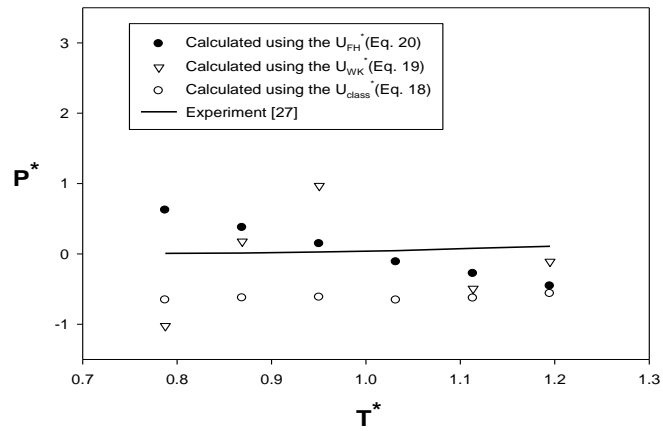
شکل (۴-۶) مقایسه بین انرژی های کاهش یافته محاسبه شده سیال نئون با استفاده از

پتانسیلهای مختلف با مقادیر تجربی



شکل (۷-۴) مقایسه بین حد فرکانس بالای کشیدگی برشی کاهش یافته محاسبه شده سیال

نئون با استفاده از پتانسیلهای مختلف با با مقادیر هر دو مقالات



شکل (۴-۸) مقایسه بین نتایج کاهش یافته محاسبه شده سیال نئون بر روی منحنی تعادل مایع-بخار

با استفاده از پتانسیلهای مختلف با مقادیر هر دو مقالات

- [1] Morsali. A , Goharshadi. E , Mansoori . G.A , Abbaspour . M , *Chem.Phys.* **2005**. 310.11-15.
- [2] Bamdad . M , Alavi . S , Najafi . B ,Keshavarzi . E , *chem. Phys.* **2006**.325 . 554-564
- [3] D.A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*, Harper and Row, New York, **1975**.
- [4] Hill. T.L , *Statistical Mechanics*, McGraw-Hill, New York, **1956**.
- [5] Haile. J.M ,Mansoori. G.A (Eds.), *Molecular-Based Study of Fluids*,American Chemical Society, Washington D.C., **1983**.
- [6] Matteoli . E , Mansoori.A (Eds.), *Fluctuation Theory of Mixtures*, Taylor & Francis Publ. Co., New York, NY, **1990**.
- [٧] Nicolas. J.J, Gubbins .K.E, Street .W.B, Tidesley .D.J, *Mol.Phys.* **1979**.37 . 1429.
- [٨] Hauschild .T, Prausnitz . J.M, *Mol. Simul.* **1993**.11 .177-185.
- [٩] Wang. L, Sadus. R.J , *J. Chem. Phys.* **2006**.125 .144509.
- [١٠] Guzman.O, del Rio.F, Ramos. J.E, *Mol. Phys.* **2011**.109 . 955-967.
- [1١] Goldman.S, *J. Phys. Chem.* **1979**. 83 . 3033.
- [1٢] Matteoli.E, Mansoori .G.A, *J. Chem. Phys.* **1995** .103 .4672.
- [1٣] <http://www.ccr.buffalo.edu/etomica/app/modules/sites/Ljmd/Background1.html>.
- [١٤] Kirkwood. J.G , Buff. F.P , *J. Chem. Phys.* **1951** .19 . 774.
- [1٥] Zwanzing. R , R. D. Mountain, *J. Chem. Phys.* **1965** .43 .4464-4471.
- [1٦] Van der Gulik. P. S , *Physica A.* **1998** .256 . 39.

- [۱۷] Allen. M.P , Tildesley . D.J , *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, New York, **1987**.
- [1۸] Goharshadi. E , Abbaspour . M, *Chem.Phys.* **2006** . 328 . 379-384.
- [۱۹] Barker. J.A , Fisher. R.A , Watts. R.O , *Mol. Phys.* **1971** .21 . 657-673.
- [۲۰] G. Marcelli, B.D. Todd, R.J. Sadus, *J. Chem. Phys.* **2001** .115 . 9410-9413.
- [۲۱] Marcelli. G , Sadus. R.J , *J. Chem. Phys.* **1999** .111 . 1533-1540.
- [۲۲] Axilrod B.M., Teller. E , *J. Chem. Phys.* **1943**.11 . 299-300.
- [۲3] Mikolaj. P.G , Pings. C.J , *J. Chem. Phys.* **1967**. 46 . 1401-1411.
- [۲۴] Ghahremani.H , , *Chem. Phys.* **2010**. 377 . 115-122.
- [۲۵] Abbaspour .M, *J. Mol. Liq.* **2011** .161 . 30-35.
- [۲۶] Tchouar.N, Ould-Kaddour.F, Levesque.D, *J.Chem. Phys.* **2004** .121 . 7326-7331.
- [۲۷] Tchouar.N, Ould-Kaddour.F, Benyettou. M , *J. Mol. Liq.* **2005**.122 . 69-73.
- [۲۸] Goharshadi. E , Abbaspour . M , Kashani.H, Baherololoom. M, *Theor. Chem. Account* . **2008** . 119 . 355-368.
- [۲۹] Goharshadi. E , Abbaspour . M , *Theor. Chem. Account* . **2010** .127 . 573-585.
- [۳۰] Abbaspour . M , Shakehnia .Sh, *J. Mol. Liq.* **2011** .170 . 51-60.
- [۳۱] Wigner. E.P , *Phys. Rev.* **1932**. 40 . 749-759.
- [۳۲] Kirkwood. J.G , *Phys. Rev.* **1933** .44 .31-37.

- [۳۳] Feynman. R.P , Hibbs. A, *Quantum Mechanics and Path Integral*, McGraw-Hill, New York, **1965**.
- [۳۴] Stratt. R.M , *J. Chem. Phys.* **1980**. 72 . 1685-1688.
- [۳۵] Thirumalai.D, Hall. R.W, Beme. B.J , *J. Chem. Phys.* **1984**.81 . 2523-2527.
- [۳۶] Sese´. L.M , *Mol. Phys.* **1991** .74 . 177-189.
- [۳۷] Sese´. L.M , *Mol. Phys.* **1993**. 78 . 1167-1177.
- [3۸] Ermakova.E, Solca.J, Huber. H, Marx . X, *Chem. Phys. Lett.* **1995**. 246 .204-208.
- [۳9] Abbaspour .M , *Chem. Phys.* **2012**. 392 . 107-113.
- [۴0] NIST Chemistry Webbook. Available at <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid>.
- [41] Goharshadi.E, Jami-Alahmadi . M, Najafi. B, *Can. J. Chem.* **2003** .81 . 1-6.
- [۴۲] Goharshadi.E, Abbaspour. M, *J. Chem. Theory Comput.* **2006** .2 .920-926.
- [۴۳] Smit. B , Hauschild. T , Prausnitz. M , *Mol. Phys.* **1992**. 77 . 1021–1031.
- [4۴] The MOLDY program was coded by K. Refson (**2001**), and can be downloaded from the internet at <http://www.ccp5.ac.uk/moldy/moldy.html>.
- [۴۵] Abbaspour.M, *Chem. Phys.* **2011**.389 . 121-127.
- [۴6] Senger. J.V , Kayser . R.F , Peters. C.J , WhiteJr. H.J (Eds.), *Equation of Statefor Fluid and Fluid Mixtures*, Elsevier Science, Amsterdam, **2000**.
- [۴7] Ben-Naim. A , *Water and Aqueous Solutions*, Introduction toMolecular Theory, Plenum Press, New York, **1974**.

[48] Gianotti . R.D, Wang. J , Mclaughlin. I.L , Silbert . M , *Mol. Phys.* **1993** .78 .
1293.

[49] Reed. T.M , Gubbins. K.E, *Applied Statistical Mechanics*, McGraw-Hill, New
York, **1973**.

[50] Hansen. J.P , Weis. J.J , *Phys. Rev.* **1969** .188 . 314-318.



Sabzevar Teacher Training University
Information form for M.A. Thesis

Surname : Keyvanloo	Name : Asma	Student no : 8911040
Supervisor : D. Abbaspour	Advisor : D.Salmi	
Faculty : Sciences	Major: Chemistry	
Program : physical	Field of study :M.SC	
Title of thesis : Determination of an expression for radial distribution function of a HFD-like fluid and calculate Many-body and quantum effects in some thermodynamic properties and infinite shear modulus of HFD-like and Lennard-Jones fluids using the radial distribution function		
Key words : Radial distribution function; Quantum correction; Many-body interaction		

Abstract:

We have calculated pressure, internal energy, and infinite-frequency shear modulus of two-body Hartree-Fock dispersion (HFD)-like and Lennard-Jones (LJ) potentials using the statistical mechanical formula for argon and neon, respectively. The required radial distribution functions (RDFs) have been used from two recently determined accurate expressions in the literature. Molecular dynamics simulations have been also applied to generate an expression for the RDF of HFD-like fluid in the range $0.5 \leq T^* \leq 5.1$ and $0.35 \leq \rho^* \leq 1.1$. Quantum corrections for the LJ system have been considered using the Feynman-Hibbs (FH) and Wigner-Kirkwood (WK) approaches. To take many-body forces into account for the HFD-like system, the simple three-body potentials of Guzman et al. (2011), Wang and Sadus (2006), and Hauschild and Prausnitz (1993) used with the two-body potential without requiring an expensive three-body calculation. The results show that the quantum and three-body effects improve the prediction of the pressure and internal energy of the HFD-like and LJ fluids.



Hakim sabzevari u

Faculty Sciences

Title of thesis :

Determination of an expression for radial distribution function of a HFD-like fluid and calculate Many-body and quantum effects in some thermodynamic properties and infinite shear modulus of HFD-like and Lennard-Jones fluids using the radial distribution function

Supervisor:

D. Abbaspour

Reader:

D.Salmi

Student:

Asma Keyvanloo

Sep 1391