





دانشکده شیمی  
گروه شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی رفتار فاکتور ساختار در  $k$  کم سیال زنون در نواحی مختلف  
ترمودینامیکی

دانشجو:

تکتم رضائی

استاد راهنما:

دکتر حسین نیکوفرد

استاد مشاور:

دکتر زهرا کلانتر

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تابستان ۱۳۸۹

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم

که همیشه حامی و پشتیبانم بوده و هستند

و

همسرم

که با مهربانی هایش ادامه مسیر را برایم امکان پذیر ساخت.

## ابراز تواضع و قدردانی

اکنون که به یاری پروردگار این پایان نامه به اتمام رسیده است بر خود لازم می دانم از استاد راهنمای

گرامی و دکتر جناب آقای دکتر حسین نیکوفرد که همواره حامی و پشتیبان من بوده اند و همچنین استاد مشاور سرکار

خانم دکتر زهرا کلاستر خاضعانه قدردانی نمایم و در نهایت از تمام دوستانم که با تکیه بر دوستی و محبتشان

توانستم این پروژه را به پایان برسانم کمال تشکر را دارم.

## چکیده

اخیراً تلاش‌های زیادی برای محاسبه فاکتور ساختار استاتیک،  $S(k)$ ، سیالات چگال انجام گرفته است. در کار حاضر ما برای محاسبه فاکتور ساختار استاتیک سیال زنون در حالت‌های مختلف ترمودینامیکی از تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت استفاده کرده‌ایم. نتایج بررسی رفتار فاکتور ساختار محاسبه شده نشان می‌دهد که مدل ارائه شده برای بررسی سیال زنون می‌تواند به خوبی رفتار  $S(k)$  در ناحیه‌ی گسترده‌ای از  $k$  را برای حالت‌های ترمودینامیکی با چگالی بالا نشان دهد. اما نتایج به دست آمده برای حالت‌های ترمودینامیکی با چگالی پایین بویژه رفتار  $S(k)$  در  $k$  کم مطلوب نیست. لذا ما از این مدل برای بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی‌های بالا و در نواحی  $k$  بالا استفاده کردیم. مطالعات انجام شده بر روی سیال آرگون از نتایج مشابهی برخوردار است.

از آنجایی که این مدل برای چگالی‌های پایین و در نواحی  $k$  کم مناسب نیست لذا ضروری است تا از مدل دیگری برای محاسبه فاکتور ساختار سیال زنون در این نواحی استفاده شود. مدلی که ما برای این منظور از آن بهره گرفته‌ایم بر اساس تعریفی از تابع همبستگی مستقیم بنا شده است که بر اساس آن توانستیم رفتار فاکتور ساختار سیال زنون را به خوبی برای چگالی‌های پایین و در ناحیه  $k$  کم پیش‌بینی نمائیم. نتایج حاصل نشان داد که با افزایش دما در نواحی دور از دمای بحرانی مقدار  $S(0)$  کاهش می‌یابد. همچنین مشخص گردید که مقادیر  $S(k_{\min})$  به صورت خطی با کاهش چگالی کاهش می‌یابد.

در پایان، نتایج حاصل از مدل ارائه شده با نتایج حاصل از مدل‌های دیگر و همچنین تفاوت‌ها و سازگاری‌های بین این مدل‌ها مقایسه گردیده است.

واژه‌های کلیدی: فاکتور ساختار استاتیک، سیال زنون، تابع توزیع شعاعی، سیال کرات سخت، تابع همبستگی مستقیم، سیال آرگون

## فهرست مطالب

### فصل اول: مباحث مقدماتی

۱-۱- مقدمه	۱
۲-۱- طبقه‌بندی حالت‌های مواد	۲
۱-۲-۱- حالت‌های کلاسیکی	۳
۱-۱-۲-۱- جامد	۳
۲-۱-۲-۱- مایع	۴
۳-۱-۲-۱- گاز	۴
۲-۲-۱- حالت‌های دما-پایین	۵
۱-۲-۲-۱- ابر سیال‌ها	۵
۲-۲-۲-۱- چگالش بوز- انیشتین	۶
۳-۲-۲-۱- مولکول‌های ریدبرگ	۶
۳-۲-۱- حالت‌های انرژی - بالا	۶
۱-۳-۲-۱- پلاسما (گاز یونیزه شده)	۶
۲-۳-۲-۱- پلاسمای کوآرک- گلون	۷
۳-۱- سیالات چگال	۷
۴-۱- مدل‌های پتانسیل	۱۰
۱-۴-۱- پتانسیل کره‌ی سخت	۱۰
۲-۴-۱- پتانسیل کره نرم	۱۰
۳-۴-۱- پتانسیل چاه مربعی	۱۱
۴-۴-۱- پتانسیل لنارد- جونز	۱۱
۵-۱- زنون	۱۳
۱-۵-۱- خصوصیات	۱۳
۲-۵-۱- تولید	۱۳
۳-۵-۱- ترکیبات	۱۴
۱-۳-۵-۱- هالیدها	۱۴
۲-۳-۵-۱- اکسیدها و اکسو هالیدها	۱۴

- ۱۴-۵-۴- کاربردها.....
- ۱۴-۵-۴-۱- لامپ‌های تخلیه گازی.....
- ۱۵-۵-۴-۲- لیزرها.....
- ۱۵-۵-۴-۳- کاربرد در پزشکی.....

### فصل دوم: توابع توزیع

- ۱۶-۲-۱- سیال کرات سخت .....
- ۱۶-۲-۱-۱- دینامیک کرات سخت .....
- ۱۷-۲-۲- توابع توزیع.....
- ۱۸-۲-۲-۱- تابع توزیع شعاعی.....
- ۱۸-۲-۲-۱-۱- فرمول بندی تابع توزیع شعاعی.....
- ۲۶-۲-۱-۲- محاسبه خواص ترمودینامیکی از طریق تابع توزیع شعاعی.....
- ۲۹-۲-۲-۲- تابع همبستگی مستقیم.....
- ۳۲-۳-۲- تقریب PY و HNC .....
- ۳۸-۴-۲- نظریه اختلال.....
- ۴۱-۵-۲- فاکتور ساختار.....

### فصل سوم: ارائه مدل و بررسی رفتار فاکتور ساختار

- ۴۶-۳-۱- ارائه عبارت تحلیلی برای تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت و ترسیم آن.....
- ۴۶-۳-۲- استفاده از عبارت تحلیلی بیان شده برای به دست آوردن تابع توزیع شعاعی سیال زنون در چگالی‌های مختلف.....
- ۵۲-۳-۳- بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی‌های مختلف.....
- ۵۵-۴-۳- بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی‌های مختلف.....
- ۶۲-۵-۳- بررسی نتایج مدل سیال کرات سخت در چگالی‌های پایین.....
- ۷۰-۶-۳- بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی‌های پایین.....

## فصل چهارم: بحث و نتیجه-

گیری	۸۱
آینده	
نگری	۹۶
مراجع	
	۹۸

### فهرست اشکال

- (۱-۱) - نوعی از جامد کریستالی (استرونیوم تیتانات). اتم‌های روشن‌تر اتم‌های Sr و اتم‌های تیره‌تر اتم‌های Ti هستند. ۳
- (۲-۱) - ساختار نوعی مایع تک اتمی کلاسیکی. ۴
- (۳-۱) - نمودار نوعی مربوط به پتانسیل لنارد-جونز. ۱۲
- (۱-۲) - شکل نوعی  $g(r)$  برای حالت گاز. ۲۳
- (۲-۲) - شکل نوعی  $g(r)$  برای حالت مایع. ۲۴
- (۳-۲) - شکل نوعی  $g(r)$  برای یک کریستال. ۲۵
- (۴-۲) - مقایسه رفتار توابع  $c(r)$  و  $h(r)$  برای یک سیال نوعی. ۳۰
- (۵-۲) - تغییرات تابع همبستگی مستقیم  $c_{PY}$  برای سیال کرات سخت بر حسب چگالی کاهش یافته که با اعداد بر روی نمودارها مشخص شده‌اند. ۳۷
- (۶-۲) - رسم منحنی پتانسیل با استفاده از روش WCA. ۴۱
- (۱-۳) - تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت،  $g(x)$ ، بر حسب فاصله کاهش یافته،  $x$ ، در چگالی کاهش یافته ۰/۴، ۰/۶، ۰/۸ و ۰/۹. ۵۱
- (۲-۳) - نمودار تغییر سطح زیر اولین پیک تابع توزیع شعاعی در برابر چگالی کاهش یافته. ۵۲
- (۳-۳) - نمودار تابع توزیع شعاعی سیال زنون در چگالی‌های ۸/۳۸ mol/L، ۱۵/۲۱ mol/L و ۱۶/۳۵ mol/L و ۱۸/۴۶ mol/L. ۵۴
- (۴-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = ۸/۳۸$  mol/L. ۵۹
- (۵-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = ۱۶/۳۵$  mol/L. ۶۰
- (۶-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = ۱۸/۴۶$  mol/L. ۶۱
- (۷-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = ۱۶/۷۵$  mol/L. ۶۵
- (۸-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = ۲۴/۵۸$  mol/L. ۶۶



- (۳-۹) رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = 33/51 \text{ mol/L}$  ..... ۶۷
- (۳-۱۰) تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت،  $g(x)$ ، بر حسب فاصله کاهش یافته،  $x$ ، در چگالی کاهش یافته  $0/0073$  ..... ۶۸
- (۳-۱۱) رفتار فاکتور ساختار در چگالی کاهش یافته  $0/0073$  بر حسب بردار موج کاهش یافته،  $k\sigma$  ..... ۶۹
- (۳-۱۲) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $260 \text{ K}$  و چگالی  $0/33 \text{ mol/L}$  ..... ۷۳
- (۳-۱۳) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $285 \text{ K}$  و چگالی  $0/33 \text{ mol/L}$  ..... ۷۴
- (۳-۱۴) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $300 \text{ K}$  و چگالی  $0/33 \text{ mol/L}$  ..... ۷۵
- (۳-۱۵) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $260 \text{ K}$  و چگالی  $0/76 \text{ mol/L}$  ..... ۷۶
- (۳-۱۶) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $285 \text{ K}$  و چگالی  $0/76 \text{ mol/L}$  ..... ۷۷
- (۳-۱۷) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $300 \text{ K}$  و چگالی  $0/76 \text{ mol/L}$  ..... ۷۸
- (۳-۱۸) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $285 \text{ K}$  و چگالی  $2/28 \text{ mol/L}$  ..... ۷۹
- (۳-۱۹) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $300 \text{ K}$  و چگالی  $3/04 \text{ mol/L}$  ..... ۸۰
- (۴-۱) رفتار تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت و نتایج شبیه‌سازی ورتل در چگالی کاهش یافته  $0/75$  سیال حقیقی ..... ۸۱
- (۴-۲) رفتار تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت و نتایج شبیه‌سازی ورتل در چگالی کاهش یافته  $0/85$  سیال حقیقی ..... ۸۲
- (۴-۳) رفتار تابع توزیع شعاعی سیال آرگون با مدل کرات سخت و داده‌های تجربی یارنل در چگالی  $35/38 \text{ mol/L}$  ..... ۸۴
- (۴-۴) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی  $8/38 \text{ mol/L}$  و چگالی  $18/46 \text{ mol/L}$  ..... ۸۵
- (۴-۵) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی  $16/35 \text{ mol/L}$  با استفاده از مدل سیال کرات و مدل مرجع [۸۶] ..... ۸۶
- (۴-۶) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی  $18/46 \text{ mol/L}$  با استفاده از مدل سیال کرات سخت و مدل مرجع [۸۶] ..... ۸۷

- (۷-۴) رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی mol/L ۱۶/۷۵ و چگالی ۳۳/۵۱ mol/L ..... ۸۸
- (۸-۴) رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون در چگالی ۲۴/۵۸ mol/L با استفاده از مدل سیال کرات سخت و مدل مرجع [۲۲] ..... ۸۹
- (۹-۴) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون برای چگالی ۲/۲۸ mol/L در دماهای ۲۶۰ K، ۲۸۵ K و ۳۰۰ K ..... ۹۱
- (۱۰-۴) تغییرات  $S(0)$  در برابر دما در چگالی ثابت ۰/۷۶ mol/L ..... ۹۲
- (۱۱-۴) تغییرات  $S(0)$  در برابر دما در چگالی ثابت ۰/۳۳ mol/L ..... ۹۲
- (۱۲-۴) تغییرات  $S(k_{min})$  در برابر چگالی در دمای ۲۶۰ K ..... ۹۳
- (۱۳-۴) تغییرات  $S(k_{min})$  در برابر چگالی در دمای ۲۸۵ K ..... ۹۴
- (۱۴-۴) تغییرات  $S(k_{min})$  در برابر چگالی در دمای ۳۰۰ K ..... ۹۴
- (۱۵-۴) رفتار فاکتور ساختار بر حسب بردار موج کاهش یافته،  $k$ ، در چگالی ۰/۳۳ mol/L بر اساس مدل پیشنهادی و مدل مرجع [۸۷] ..... ۹۵

### فهرست جداول

- ۳۵.....(۱-۲) - طبقه‌بندی انواع خوشه‌های مولکولی در بسط نموداری تابع  $c(r)$  معادله (۲-۳۲).....
- ۴۹.....(۱-۳) - داده‌های مربوط به تابع توزیع شعاعی چندین چگالی کاهش یافته.....
- ۵۰.....(۲-۳) - داده‌های مربوط به تابع توزیع شعاعی چندین چگالی کاهش یافته.....
- ۵۳.....(۳-۳) - تابع توزیع شعاعی سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی‌های مختلف.....
- ۵۶.....(۴-۳) - داده‌های  $S(k)$  سیال زنون در چگالی  $۸/۳۸ \text{ mol/L}$ .....
- ۵۷.....(۵-۳) - داده‌های  $S(k)$  سیال زنون در چگالی  $۱۶/۳۵ \text{ mol/L}$ .....
- ۵۸.....(۶-۳) - داده‌های  $S(k)$  سیال زنون در چگالی  $۱۸/۴۶ \text{ mol/L}$ .....
- ۶۲.....(۷-۳) - داده‌های  $S(k)$  سیال آرگون در چگالی  $۱۶/۷۵ \text{ mol/L}$ .....
- ۶۳.....(۸-۳) - داده‌های  $S(k)$  سیال آرگون در چگالی  $۲۴/۵۸ \text{ mol/L}$ .....
- ۶۴.....(۹-۳) - داده‌های  $S(k)$  سیال آرگون در چگالی  $۳۳/۵۱ \text{ mol/L}$ .....
- ۷۱.....(۱۰-۳) - پارامتر بهینه شده B در چگالی‌های مختلف در دمای  $۲۶۰ \text{ K}$  و قطر مولکولی  $۳/۱۳۰ \text{ \AA}^0$ .....
- ۷۲.....(۱۱-۳) - پارامتر بهینه شده B در چگالی‌های مختلف در دمای  $۲۸۵ \text{ K}$  و قطر مولکولی  $۳/۰۳۷ \text{ \AA}^0$ .....
- ۷۲.....(۱۲-۳) - پارامتر بهینه شده B در چگالی‌های مختلف در دمای  $۳۰۰ \text{ K}$  و قطر مولکولی  $۲/۸۸۰ \text{ \AA}^0$ .....



## ۱-۱- مقدمه

حالت‌های ماده شکل‌های مشخصی هستند که فازهای متفاوت یک ماده به خود می‌گیرد. تمایز بین حالت‌های ماده بر اساس تفاوت‌های کیفی در خواص توده آن استوار است. جامد حالتی است که در آن ماده حجم و شکل ثابتی دارد. مایع حالتی است که ماده حجم ثابتی دارد اما شکل ظرفی که در آن قرار گرفته را به خود می‌گیرد و گاز حالتی است که در آن ماده منبسط می‌شود تا هر حجمی که موجود است را اشغال کند. اخیراً تفاوت‌ها میان حالت‌های یک ماده بر اساس تفاوت در وابستگی‌های مولکولی آنها تعبیر می‌شود که در این صورت تعاریف زیر ارائه می‌گردد:

جامد حالتی است که در آن جاذبه‌های بین مولکولی، مولکول‌ها را در پیوندهای فضایی ثابت نگه می‌دارد.

مایع حالتی است که در آن جاذبه‌های بین مولکولی، مولکول‌ها را در مجاورت هم قرار می‌دهد اما در ارتباطات فضایی ثابت نگه نمی‌دارد.

گاز حالتی است که در آن مولکول‌ها دور از هم هستند و جاذبه‌های بین مولکولی اثر نسبتاً کمی بر حرکات آنها دارند.

پلازما<sup>۱</sup>، یک گاز یونیزه شده است که در دماهای بالا ایجاد می‌شود. نیروهای بین مولکولی که توسط جاذبه‌ها و دافعه‌های یونی ایجاد می‌شوند به این ترکیبات خواص ویژه‌ای می‌دهند، به همین دلیل پلازما به عنوان چهارمین حالت ماده معرفی می‌شود [۱ و ۲]. شکل‌هایی از ماده که از مولکول‌ها

---

<sup>۱</sup> - Plasma

تشکیل نشده و به وسیله نیروهای مختلفی ایجاد گردیده‌اند نیز می‌توانند به عنوان حالت‌های متفاوتی از ماده در نظر گرفته شوند. پلاسمای کوآرک- گلون<sup>۱</sup> [۱۰] و چگالش فرمیونی<sup>۲</sup> [۱۰] از این قبیل هستند.

همچنین ممکن است حالت‌های ماده تحت عنوان انتقالات فازی<sup>۳</sup> تعریف شوند. یک انتقال فاز، تغییر در ساختار را نشان می‌دهد و به وسیله یک تغییر ناگهانی در خواص مشخص می‌شود. با این تعریف، حالت مشخص ماده شامل مجموعه حالت‌هایی است که از مجموعه حالت‌های دیگر به وسیله یک انتقال فاز متمایز می‌شود. آب می‌تواند چندین حالت جامد مشخص داشته باشد [۳].

پیدایش ابر رسانایی با انتقال فاز همراه است بنابراین حالت‌های ابررسانا<sup>۴</sup> نیز وجود دارند. علاوه بر این، حالت‌های کریستالی مایع و فرومغناطیس<sup>۵</sup> به وسیله انتقالات فازی نشان‌گذاری می‌شود و خواص مشخصی دارند.

## ۱-۲- طبقه بندی حالت‌های مواد:

چندین حالت مختلف برای مواد تعریف می‌شود که می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

الف) حالت‌های کلاسیکی که خود به سه دسته جامد، مایع و گاز طبقه‌بندی می‌شوند.

ب) حالت‌های غیر کلاسیکی از ماده که می‌توان به شیشه کریستالی<sup>۶</sup>، مایع کریستالی و منظم شده توسط نیروی مغناطیسی<sup>۷</sup> اشاره کرد.

پ) حالت‌های دما-پایین از جمله ابر سیال‌ها<sup>۸</sup> و چگالش بوز-اینشتین<sup>۹</sup> [۹] و مولکول‌های ریذبرگ<sup>۱۰</sup> [۹].

---

<sup>۱</sup>-Quark-gluon

<sup>۲</sup>- Fermionic condensate

<sup>۳</sup>- Phase transition

<sup>۴</sup>- Super conductor

<sup>۵</sup>- Ferromagnetic

<sup>۶</sup>-Crystalline. Vs. glassy

<sup>۷</sup>-Magnetically-ordered

<sup>۸</sup>-Super fluids

<sup>۹</sup>-Bose-Einstein condensates

<sup>۱۰</sup>-Rydberg molecules

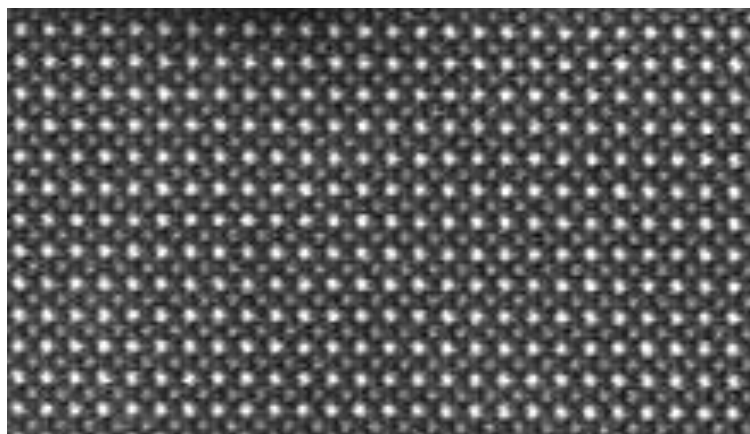
ت) حالت‌های انرژی بالا که شامل پلازما و پلاسمای کوآرک-گلون [۱۰] می‌باشد.  
با توجه به اهمیت حالت‌های کلاسیکی در ادامه به شرح تفصیلی این حالت‌ها پرداخته شده و نیز تعاریف مختصری از حالت‌های دما-پایین و انرژی-بالا بیان شده است.

## ۱-۲-۱- حالت‌های کلاسیکی:

### ۱-۱-۲-۱- جامد

در جامدات ذرات تشکیل دهنده ماده (یون‌ها، اتم‌ها یا مولکول‌ها) نزدیک یکدیگر قرار دارند. نیروهای بین ذرات بسیار قوی است، به همین دلیل ذرات نمی‌توانند آزادانه حرکت کنند و تنها حول موقعیت تعادلی خود ارتعاش می‌کنند.

بنابراین یک جامد شکل پایدار، مشخص و حجم معینی دارد. جامدات زمانی تغییر شکل می‌یابند که نیرویی بر آنها وارد شود مانند زمانی که شکسته می‌شوند یا تراش می‌خورند. در جامدات کریستالی، ذرات (اتم‌ها، مولکول‌ها یا یون‌ها) در ساختار سه بعدی منظم آرایش یافته‌اند. تعداد زیادی ساختارهای کریستالی متفاوت وجود دارد و یک ماده معین می‌تواند بیش از یک ساختار داشته باشد. در شکل (۱-۱) نوعی از جامد کریستالی نشان داده شده است [۴].

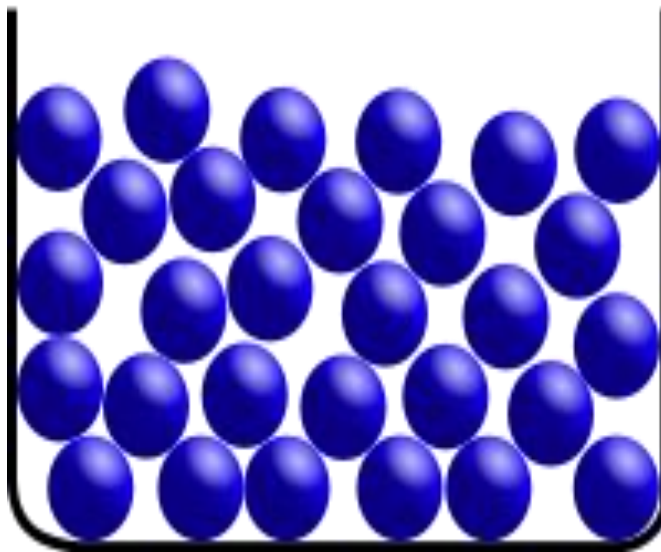


شکل (۱-۱) - نوعی از جامد کریستالی (استرونیوم تیتانات). اتم‌های روشن‌تر اتم‌های Sr و اتم‌های تیره‌تر اتم‌های Ti هستند [۴].

در فرآیند ذوب، جامدات به مایعات تبدیل می‌شوند. همچنین جامدات می‌توانند به طور مستقیم از طریق فرآیند تصعید به گاز تبدیل شوند [۴].

### ۱-۲-۱-۲- مایع

مایعات در دما و فشار ثابت حجم معینی دارند. زمانی که جامد بیش از نقطه ذوب حرارت داده شود به مایع تبدیل می‌گردد. با وجود اینکه در مایعات نیروهای بین مولکولی (یا بین اتمی یا بین یونی) دارای اهمیت هستند اما مولکول‌ها انرژی کافی برای حرکت کردن دارند و ساختار مایع متحرک است. این بدان معنی است که شکل مایع معین نیست و به وسیله ظرفی که در آن قرار گرفته است تعیین می‌شود. حجم مایع معمولاً از جامد متناظر با آن بیشتر است. تنها استثنائی که در این مورد شناخته شده آب است [۵]. در شکل (۱-۲) ساختار نوعی از مایع تک اتمی کلاسیکی نمایش داده شده است [۵].





شکل (۱-۲) - ساختار نوعی مایع تک اتمی کلاسیکی [۵].

### ۱-۲-۱-۳- گاز

در یک گاز مولکول‌ها به قدر کافی انرژی جنبشی دارند و اثر نیروهای بین مولکولی اندک است (برای گاز ایده آل صفر است) و فاصله معمول بین مولکول‌های همسایه بزرگتر از اندازه مولکولی است. یک گاز شکل یا حجم معینی ندارد اما تمام حجم ظرفی که در آن محبوس شده است را اشغال می‌کند.

مایع ممکن است با حرارت دادن تا نقطه جوش در فشار ثابت یا به وسیله کاستن فشار در دمای ثابت به گاز تبدیل شود. گاز در دماهای پایین‌تر از دمای بحرانی<sup>۱</sup>، بخار نامیده می‌شود و می‌تواند تنها با متراکم سازی و بدون سرد کردن به مایع تبدیل شود. بخار می‌تواند در تعادل با مایع (یا جامد) وجود داشته باشد، در این مورد فشار گاز با فشار بخار مایع (یا جامد) برابر است [۶].

در گازهای ایده آل، توزیع ذرات کاملاً تصادفی است و مولکول‌ها دارای حرکات انتقالی سریع هستند. در این سیستم‌ها برهم‌کنش بین مولکولی بسیار ضعیف و حجم مولکول‌ها در مقایسه با فاصله بین آنها بسیار کوچک است به طوری که به عنوان یک مدل ساده و قابل قبول می‌توان از برهم‌کنش بین مولکولی صرف نظر کرد و با استفاده از معادله حالت گاز ایده آل،  $PV=nRT$ ، خواص ترمودینامیکی گازها را به دست آورد (در این معادله  $P, V, T, n$  و  $R$  به ترتیب نماد فشار، حجم، دما، تعداد مول و ثابت جهانی گازها است) [۷].

در مهندسی شیمی سیال ابر بحرانی<sup>۲</sup> (SCF) به گازی گفته می‌شود که دما و فشار آن بالای دما و فشار بحرانی قرار دارد. سیال ابر بحرانی خواص فیزیکی یک گاز را دارد اما در بعضی موارد به دلیل چگالی بالا خواص حلال را دارد که این ویژگی منجر به کاربردهای مفیدی برای آن می‌شود [۶].

<sup>۱</sup> - Critical temperature

<sup>۲</sup> - Super critical fluid

## ۱-۲-۲- حالت‌های دما-پایین:

### ۱-۲-۲-۱ ابرسیال‌ها

بعضی از مایعات در نزدیکی صفر مطلق، حالت دیگری تحت عنوان ابر سیال را تشکیل می‌دهند که گر انرژی صفر یا سیالیت نامحدود<sup>۱</sup> دارد. در سال ۱۹۳۷ کشف شد که هلیوم یک ابر سیال زیر دمای لاند  $2/17\text{ K}$  تشکیل می‌دهد [۸].

### ۱-۲-۲-۲- چگالش بوز-انیشترین

در سال ۱۹۲۴ بوز<sup>۲</sup> و آلبرت انیشترین<sup>۳</sup> [۹] چگالش بوز-انیشترین را پیش‌بینی کردند که بعضی از مواقع به پنجمین حالت ماده اشاره دارد. در فاز گازی، چگالش بوز-انیشترین برای چندین سال یک تئوری اثبات نشده باقی ماند [۹].

### ۱-۲-۲-۳- مولکول‌های ریدبرگ

یکی از حالت‌های کم ثبات پلاسمای غیر ایده آل، مولکول‌های ریدبرگ است که به محض تراکم اتم‌های برانگیخته تشکیل می‌شود. این اتم‌ها همچنین اگر به دمای مشخصی برسند می‌توانند به یون-ها و الکترون‌ها تبدیل شوند [۹].

## ۱-۲-۳- حالت‌های انرژی-بالا:

### ۱-۲-۳-۱- پلاسما (گاز یونیزه شده)

پلاسما یا گاز یونیزه شده می‌تواند در دماهایی از چندین هزار درجه سانتیگراد وجود داشته باشد. دو مثال از پلاسما، هوای باردار تولید شده توسط آذرخش و یک ستاره مانند خورشید است. به محضی که گاز به اندازه کافی گرم می‌شود، الکترون‌ها از اتم‌ها خارج شده و در حضور الکترون‌های آزاد پلاسما دارای بار الکتریکی می‌شود [۱۰].

<sup>۱</sup>- Infinite fluidity

<sup>۲</sup>- Bose

<sup>۳</sup>- Albert Einstein

بارهای الکتریکی آزاد سبب می‌گردد پلاسما از نظر الکتریکی رسانا شده و به شدت به میدان‌های الکترومغناطیس پاسخ دهد. در دماهای بسیار بالا، فرض می‌شود که تمام الکترون‌ها آزاد هستند و پلاسما دارای انرژی بسیار بالا، به طور کلی به صورت هسته‌های شناور در دریایی از الکترون‌ها آشکار می‌شود. پلاسما معمولترین حالت ماده شفاف در جهان است. پلاسما می‌تواند به عنوان یک گاز با ذرات یونیزه شده در نظر گرفته شود، اما وجود نیروهای بین یونی قدرتمند در آن منجر به خصوصیات متفاوتی می‌شود. بنابراین پلاسما معمولاً به عنوان یک حالت متفاوت از ماده در نظر گرفته می‌شود [۱۰].

### ۱-۲-۳-۲- پلاسما کوآرک-گلون

پلاسما کوآرک-گلون حالتی از ماده است که در سال ۲۰۰۰ در CERN کشف شد. کوآرک‌ها<sup>۱</sup> که معمولاً تمایل دارند پروتون‌ها و نوترون‌ها را بسازند در این نوع حالت رها هستند و می‌توانند به صورت منفرد مشاهده شوند [۱۰].

در بین حالت‌های مختلف مواد، گازهای حقیقی و مایعات در دسته سیالات چگال قرار می‌گیرند که این سیالات در زیر به تفصیل معرفی می‌شوند.

### ۱-۳- سیالات چگال

در سیستم‌های چگال، مولکول‌ها به یکدیگر نزدیک‌اند بنابراین برهم‌کنش بین آنها اهمیت زیادی دارد و بسیاری از خواص ماده به چنین برهم‌کنش‌هایی مرتبط است. بررسی سیالات چگال از نقطه نظر مولکولی مشکل است، زیرا توزیع ذرات در سیستم نه مانند گازهای رقیق به صورت تصادفی است و نه مانند جامدات در کل شبکه به صورت منظم توزیع شده‌اند. به عبارت دیگر در سیستم‌های چگال نه بی‌نظمی کامل (توزیع تصادفی) و نه نظم سراسری (حالت بلوری) وجود دارد بلکه یک نظم موضعی<sup>۲</sup> حاکم است. سیالات چگال مانند مایعات دو ویژگی مهم دارند. اول اینکه وجود نیروهای دافعه

---

<sup>۱</sup> - Quarks

<sup>۲</sup> - Local ordering

باعث می‌شود تراکم به‌سختی انجام شود. دوم اینکه به نظر می‌رسد برهم‌کنش مؤثر یکسانی بین جفت‌های تشکیل دهنده سیستم حاکم باشد به طوری که تمام این سیستم‌ها از برخی قاعده بندی-های یکسان تبعیت می‌کنند [۱۱].

هر چند در حال حاضر تلاش‌های زیادی برای بررسی بسیاری از خواص سیالات چگال صورت می‌گیرد ولی تحقیقات در این زمینه به توسعه و شناخت بیشتری احتیاج دارد. به عنوان مثال برخی از مسایل در ارتباط با انتقال فازها، پدیده بحرانی، فرآیندهای برگشت ناپذیر و انتقالی هنوز حل نشده باقی مانده است [۱۲ و ۱۷].

هدف نهایی در مکانیک آماری<sup>۱</sup>، برقراری ارتباط بین خواص ماکروسکوپی قابل مشاهده با جزئیات بین مولکولی ذرات سیستم است [۱۳ و ۱۴]. مطالعه ساختار سیالات چگال با استفاده از آزمایشات پراکندگی اشعه-X و تابش نوترونی و پی بردن به نظم کوتاه برد در این سیالات موجب ارائه نظریه‌های جدیدی بر اساس توابع توزیع گردیده است [۱۵ و ۱۶].

یکی از این توابع، تابع همبستگی جفت<sup>۲</sup> یا تابع توزیع شعاعی<sup>۳</sup> (RDF)، با نماد  $g(r)$  است. تابع توزیع شعاعی ارتباط اصلی بین خواص ماکروسکوپی و برهم‌کنش‌های بین مولکولی سیالات است [۱۷]. همچنین تابع توزیع شعاعی، مفیدترین خصوصیت در مطالعه ساختار یک ماده است و احتمال یافتن یک مولکول در فاصله مشخصی از یک مولکول مرکزی دلخواه را نشان می‌دهد [۱۸].

تابع همبستگی جفت را می‌توان به طور تجربی از آزمایشات پراکندگی به‌دست آورد ولی به دلیل محدودیت‌های آزمایشگاهی، تلاش‌های فراوانی برای محاسبه این تابع از طریق روش‌های نظری انجام شده است [۱۹ و ۲۰]. یکی از این روش‌ها، حل معادله اورنشتین-زرنیک<sup>۴</sup> [۲۱ و ۱۳ و ۷]، OZ، است که در این روش سعی می‌شود تابع همبستگی جفت بر اساس مدل پتانسیل محاسبه شود [۲۱ و ۱۳ و ۷].

---

<sup>۱</sup>- Statistical mechanics

<sup>۲</sup>- Pair correlation function

<sup>۳</sup>- Radial distribution function

<sup>۴</sup>-Ornstein-Zernike

در روش فوق تابع همبستگی کل<sup>۱</sup>،  $h(r) = g(r) - 1$ ، به دو بخش تقسیم می‌شود:

۱- اثر مستقیم مولکول ۱ بر مولکول ۲ که با تابع همبستگی مستقیم<sup>۲</sup> (DCF)،  $c(r)$ ، نشان داده می‌شود و کوتاه برد است.

۲- اثر غیر مستقیم مولکول ۱ که توسط مولکول ۳ تحت تأثیر قرار می‌گیرد و بر ارتباط مولکول ۱ با مولکول ۲ تأثیر می‌گذارد [۲۲].

تابع همبستگی مستقیم در مقایسه با تابع توزیع شعاعی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. بر خلاف تابع توزیع شعاعی که در ناحیه بحرانی بلند برد است، تابع همبستگی مستقیم، DCF، در تمام حالت‌های ترمودینامیکی حتی نزدیک ناحیه بحرانی کوتاه برد است [۷، ۲۳].

دیگر اینکه تمام خواص ترمودینامیکی سیالات چگال را می‌توان با استفاده از این تابع و بدون در نظر گرفتن تقریب جمع پذیری جفت گونه<sup>۳</sup> که در چگالی‌های بالا اعتبار ندارد، به دست آورد [۲۱ و ۲۴]. همچنین تابع همبستگی مستقیم به‌طور تجربی از اندازه‌گیری فاکتور ساختار<sup>۴</sup> سیال،  $S(k)$ ، در آزمایشات پراکندگی قابل تعیین است [۲۵ و ۲۶].

در فیزیک ماده متراکم و کریستالوگرافی<sup>۵</sup>، فاکتور ساختار استاتیک، توصیف ریاضی از این موضوع است که یک ماده چگونه پرتو برخوردی را پراکنده می‌سازد. فاکتور ساختار ابزار مفیدی در تفسیر الگوهای تداخلی بدست آمده از آزمایشات پراکندگی اشعه-X و تابش نوترونی و الکترونی است. فاکتور ساختار استاتیک بدون تجزیه کردن انرژی پراکنده شده فوتون‌ها/الکترون‌ها/نوترون‌ها اندازه‌گیری می‌شود. اندازه‌گیری انرژی تجزیه شده فاکتور ساختار دینامیک را بدست می‌دهد [۲۷].

---

<sup>۱</sup>- Total correlation function  
<sup>۲</sup>- Direct correlation function  
<sup>۳</sup>- Pairwise additivity  
<sup>۴</sup>- Structure factor  
<sup>۵</sup>- Crystallography

امروزه تلاش‌های فراوانی برای پیش‌بینی فاکتور ساختار صورت می‌گیرد. این کار هم با استفاده از محاسبات شبیه‌سازی<sup>۱</sup> و دینامیک مولکولی<sup>۲</sup> و هم از محاسبه توابع همبستگی بویژه تابع همبستگی مستقیم در نظریه‌های نوین سیالات چگال قابل انجام است [۲۸ و ۲۹].

با داشتن معادله تحلیلی تابع همبستگی مستقیم،  $c(r)$ ، و به کمک رابطه OZ می‌توان رفتار  $S(k)$  را پیش‌بینی نمود. اما موفقیت هر یک از روش‌ها به انتخاب مدل پتانسیل مناسب برای سیستم چگال بستگی دارد. به همین دلیل در ادامه به معرفی چندین مدل پتانسیل پرداخته شده است.

## ۱-۴- مدل‌های پتانسیل

مدل‌های متفاوتی برای پتانسیل وجود دارد که از آن دسته می‌توان به مدل‌هایی نظیر مدل کرات سخت<sup>۳</sup>، چاه مربعی<sup>۴</sup>، چاه مثلثی<sup>۵</sup>، ساترلند<sup>۶</sup> و مدل لنارد-جونز<sup>۷</sup> و غیره اشاره کرد. استفاده از مدل‌های ساده برهم‌کنش موجب می‌شود تا مسائل پیچیده ریاضی، شامل انتگرال‌های انرژی پیکربندی، به طور دقیق و یا با حداقل تقریب حل گردد.

### ۱-۴-۱- پتانسیل کره‌ی سخت

کرات سخت به عنوان کرات نفوذ ناپذیری تعریف می‌شوند که نمی‌توانند در فضا هم‌پوشانی کنند [۳۰]. مدل پتانسیل کره‌ی سخت عبارت است از:

$$\phi(r) = \begin{cases} +\infty & r \leq \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases} \quad (1-1)$$

---

<sup>۱</sup>- Simulation  
<sup>۲</sup>- Molecular dynamics  
<sup>۳</sup>- Hard sphere  
<sup>۴</sup>- Square-well  
<sup>۵</sup>- Triangular-well  
<sup>۶</sup>- Sutherland  
<sup>۷</sup>- Lennard-Jones

که  $\sigma$  قطر مولکولی برخورد است. بر اساس این مدل دو مولکول تا زمانی که بر هم مماس نشوند انرژی برهم کنش ندارند ولی به محض تماس آن دو، پتانسیل با شیب نامحدود افزایش می‌یابد. در این پتانسیل سهمی برای جاذبه وجود ندارد و رفتار دافعه شبیه مولکولهای واقعی است اما شیب تندتری دارد [۱۱].

### ۱-۴-۲- پتانسیل کره‌ی نرم

یک تصحیح ساده برای پتانسیل کره‌ی سخت منجر به مدل کره‌ی نرم<sup>۱</sup> یا دافعه‌ی مرکز نقطه‌ای می‌شود. در این مدل پتانسیل نیز سهمی برای جاذبه وجود ندارد اما شیب تند دافعه مدل کره‌ی سخت تعدیل شده است. پتانسیل کره‌ی نرم به قرار زیر است [۱۱]:

$$\phi(r) = \frac{K}{r^n} = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^n, \quad n > 3 \quad (2-1)$$

### ۱-۴-۳- پتانسیل چاه مربعی

مدل دیگری که نسبت به کره‌ی سخت واقع‌بینانه‌تر است مدل پتانسیل چاه مربعی است. این پتانسیل ساده‌ترین مدلی است که هم اندازه مولکولی و هم سهم جاذبه در آن منظور شده است. این پتانسیل شبیه پتانسیل کره‌ی سخت است، اما در فاصله‌های بینابین که سهم جاذبه مهم است تفاوت محسوسی وجود دارد. عبارت ریاضی برای این مدل پتانسیل چنین است:

$$\phi(r) = \begin{cases} +\infty & r \leq \sigma \\ -\varepsilon & \sigma < r < \lambda\sigma \\ 0 & r \geq \lambda\sigma \end{cases} \quad (3-1)$$

که  $\varepsilon, \lambda$  به ترتیب عرض و عمق چاه پتانسیل است [۱۱].

### ۱-۴-۴- پتانسیل لنارد-جونز

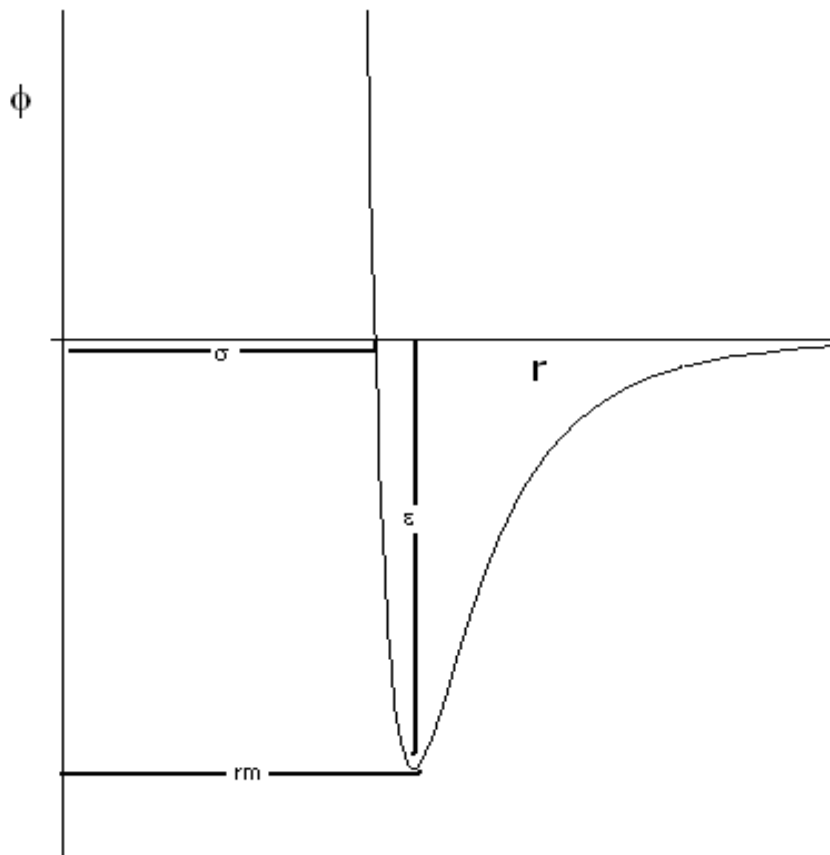
---

<sup>۱</sup> - Soft sphere

مدلهایی که بیان شد، پتانسیل برهم‌کنش واقعی دو مولکول را نشان نمی‌دهند. پتانسیل واقع-بینانه‌تری مورد نیاز است. پتانسیل لnard-جونز حداقل از لحاظ کیفی رفتار واقعی برهم‌کنش دو مولکول کروی را نشان می‌دهد. مدل پتانسیل لnard-جونز از این قرار است [۱۱]:

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (4-1)$$

در شکل (۳-۱) پتانسیل لnard-جونز نمایش داده شده است. در این شکل  $\sigma$  قطر مولکولی،  $\varepsilon$  عمق چاه پتانسیل و  $r_m$  فاصله‌ای است که در آن  $\frac{\partial \phi}{\partial r} = 0$  می‌شود [۱۱]. همانطور که مشاهده می‌شود این مدل پتانسیل هر دو سهم جاذبه و دافعه را دارا می‌باشد. طبق این مدل پتانسیل در فواصل دور برهم‌کنشی بین ذرات وجود ندارد و پتانسیل بین ذرات صفر است. اما با نزدیک شدن ذرات نیروی جاذبه بین آنها ایجاد شده و نیروی غالب، جاذبه است و با نزدیک تر شدن ذرات نیروی دافعه غالب می‌گردد.





شکل (۱-۳) - نمودار نوعی مربوط به پتانسیل لنارد-جونز [۱۵].

در این تحقیق، ما توجه خود را روی سیال زنون که یکی از سیالات ساده است، معطوف می‌کنیم. در سیالات ساده برهم‌کنش‌های بین مولکولی دارای تقارن کروی و نیروها از نوع مرکزی هستند و از طریق مرکز جرم مولکول اعمال می‌شوند (نیروهایی که به فاصله‌ی دو مولکول از یکدیگر بستگی دارد) [۷].

با توجه به اینکه مطالعات بر روی سیال زنون صورت گرفته ضروری است در ابتدا مطالبی کلی در ارتباط با سیال زنون ارائه گردد. در زیر اشاراتی به خصوصیات، نحوه‌ی تولید، ترکیبات و کاربردهای زنون می‌شود.

## ۱-۵- زنون

### ۱-۵-۱- خصوصیات:

زنون یک عنصر شیمیایی است که با نماد Xe نشان داده می‌شود. عدد اتمی آن ۵۴ است. زنون گاز نجیب<sup>۱</sup> بی‌بو، بی‌رنگ و سنگین است و به مقدار کم در اتمسفر زمین یافت می‌شود [۳۱]. با اینکه زنون به طور کلی واکنش ناپذیر است ولی می‌تواند تحت بعضی از واکنش‌های شیمیایی مانند تشکیل هگزا فلورو پلاتینات زنون<sup>۲</sup> قرار گیرد. این ماده نخستین ترکیب گاز نجیب می‌باشد که سنتز شده است [۳۲ و ۳۳ و ۳۴]. زنون شامل ۹ ایزوتوپ پایدار است و بیش از ۴۰ ایزوتوپ ناپایدار دارد که بر اثر پرتو زایی از بین می‌روند. زنون ۱۳۵ در نتیجه شکافت هسته‌ای به دست می‌آید و به عنوان یک جاذب نوترونی در واکنش‌های هسته‌ای عمل می‌کند [۳۵ و ۳۶].

در دما و فشار استاندارد، گاز زنون خالص چگالی  $5/761 \text{ kg/m}^3$  دارد که حدود  $4/5$  برابر چگالی زنون در اتمسفر زمین،  $1/217 \text{ kg/m}^3$ ، می‌باشد. در حالت مایع زنون چگالی تا  $3100 \text{ kg/m}^3$  دارد

<sup>۱</sup> - Noble gas

<sup>۲</sup> - Xenon hexafluoropelatinat

که برابر با ماکزیمم چگالی در نقطه سه گانه است. تحت شرایط یکسان، چگالی زنون جامد  $3640 \text{ kg/m}^3$  از چگالی متوسط گرانیت  $2750 \text{ kg/m}^3$  بیشتر است. با اعمال فشارهای در حد گیگا پاسکال زنون به فاز فلزی تبدیل می‌شود [۳۷ و ۳۸ و ۳۹].

زمانی که زنون به فلز تبدیل می‌شود به رنگ آبی آسمانی به نظر می‌رسد. زیرا نور قرمز را جذب می‌کند و فرکانس‌های مرئی دیگر را پراکنده می‌سازد. چنین رفتاری برای یک فلز غیرعادی است و توسط پهنای نسبتاً کوچک پیوندهای الکترونی در زنون فلزی توضیح داده می‌شود [۴۰ و ۴۱].

### ۱-۵-۲- تولید:

زنون به طور تجاری از روش تفکیک هوا به اکسیژن و نیتروژن به دست می‌آید. در فرآیند جداسازی که توسط تقطیر جزء به جزء در دستگاه ستون-مضاعف انجام می‌شود، اکسیژن مایع حاصل شده حاوی مقدار کمی کریپتون و زنون خواهد بود. با انجام مراحل تقطیر جزء به جزء اضافی، اکسیژن مایع غنی شده و حاوی  $2/1-0/1$  درصد مخلوط کریپتون/زنون می‌گردد که هر یک توسط جذب سطحی بر روی ژل سیلیکا یا توسط تقطیر استخراج می‌شوند. سرانجام، مخلوط کریپتون/زنون ممکن است توسط تقطیر به کریپتون و زنون تفکیک شود. استخراج یک لیتر زنون از اتمسفر به ۲۲۰ وات-ساعت انرژی نیاز دارد [۴۲ و ۴۳].

### ۱-۵-۳- ترکیبات:

#### ۱-۳-۵-۱- هالیدها

فلوریدها تقریباً نقطه شروع سنتز تمام ترکیبات زنون هستند و تا کنون سه فلورید شناسایی شده

است که عبارتند از:  $XeF_2, XeF_4, XeF_6$  [۴۴].

#### ۱-۳-۵-۲- اکسیدها و اکسوهالیدها

تنها دو اکسید زنون شناخته شده است: تری اکسید زنون ( $XeO_3$ ) و تترا اکسید زنون ( $XeO_4$ ) که هر دو به طور خطرناکی منفجر شوند هستند و از عوامل اکسنده قوی محسوب می‌شوند. علاوه بر اکسیدها و هالیدها تعدادی از اکسی فلوراید های زنون شامل  $XeOF_2$ ,  $XeOF_4$ ,  $XeO_2F_2$ ,  $XeO_3F_2$  نیز شناسایی شده‌اند [۴۵ و ۴۶].

#### ۱-۵-۴- کاربرد ها:

#### ۱-۵-۴-۱- لامپ‌های تخلیه گازی<sup>۱</sup>

زنون در وسایل نشر نوری که لامپ‌های تشعشعی زنون نامیده می‌شود، به کار می‌رود. همچنین برای تحریک ماده فعال در لیزرها که نور منسجم تولید می‌کنند و گاهی اوقات در لامپ‌های نابود کننده باکتری استفاده می‌شود [۴۷]. نخستین لیزر حالت جامد در ۱۹۶۰ اختراع شد که توسط یک لامپ تشعشعی زنون پمپ شده بود [۴۸].

#### ۱-۵-۴-۲- لیزرها

در سال ۱۹۶۲، یک گروه از محققین در آزمایشگاه Bell عمل لیزری زنون را کشف کردند و بعدها دریافتند که عمل لیزر با اضافه کردن هلیوم به ماده فعال بهبود می‌یابد [۴۹ و ۵۰ و ۵۱].

#### ۱-۵-۴-۳- کاربرد در پزشکی

زنون به عنوان یک بیهوش کننده عمومی و نیز در درمان آسیب‌های مغزی استفاده می‌شود. نشر گاما از رادیو ایزوتوپ  $^{133}Xe$  زنون، برای تصویر کردن قلب و ریه و مغز استفاده می‌شود. همچنین می‌توان از این ایزوتوپ برای اندازه‌گیری جریان خون استفاده کرد [۵۲ و ۵۳ و ۵۴].

از آنجا که در این تحقیق سعی شده است تا رفتار فاکتور ساختار سیال زنون بر اساس مدل کرات سخت مطالعه گردد، لذا در فصل دوم ابتدا مطالبی در ارتباط با سیال کرات سخت عنوان شده و

---

<sup>۱</sup> - Gas-discharge lamps

سپس با توجه به استفاده از توابع توزیع برای بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون، مروری کلی بر توابع توزیع و فاکتور ساختار خواهیم داشت.

## ۲-۱- سیال کرات سخت:

سیال کرات سخت به طور وسیع به عنوان ذرات مدل در تئوری مکانیک آماری سیالات و جامدات استفاده می‌شود. کرات سخت به صورت کرات غیر قابل نفوذ تعریف می‌شوند که نمی‌توانند در فضا هم پوشانی کنند [۳۰]. در این مدل هیچ نیرویی روی ذرات عمل نمی‌کند مگر در لحظه‌ای که آنها فاصله کمی از یکدیگر دارند. به منظور بررسی کردن حرکت ذرات، تنها آگاهی از زمان برخوردها و سرعت-های پس از برخورد مورد نیاز است [۵۵].

## ۲-۱-۱- دینامیک کرات سخت

کرات سخت متحمل برخوردهای آنی و دو به دو می‌شوند. هرگز سه یا تعداد بیشتری از کرات سخت به طور همزمان به یکدیگر برخورد نمی‌کنند. برخورد کرات سخت سبب می‌گردد تا کرات برخورد کننده نیروی نامحدودی را در مدت زمانی کوتاه تحمل کنند و این نیرو، تکانه<sup>۱</sup> محدودی را ایجاد می‌کند. این تکانه موجب تغییر مساوی و در جهت عکس در اندازه حرکت دو کره برخورد کننده می‌گردد. نیرو در طول مراکز دو اتم متمرکز می‌شود و دو ذره را از یکدیگر می‌رانند. اندازه تکانه به وسیله اصل بقای انرژی<sup>۲</sup> کنترل می‌شود. اگر اندازه حرکت هر اتم در ارتباط با تکانه،  $\Delta\vec{P}$ ، به صورت زیر نشان داده شود [۵۶]:

$$\vec{P}_1^{New} = \vec{P}_1^{Old} + \Delta\vec{p} \quad (1-2)$$

$$\vec{P}_2^{New} = \vec{P}_2^{Old} + \Delta\vec{p} \quad (2-2)$$

که  $\vec{P}_1$  و  $\vec{P}_2$  به ترتیب اندازه حرکت اتم ۱ و ۲ می‌باشد و انرژی ذرات تنها به خاطر انرژی جنبشی آنها است. بر اساس اصل بقای انرژی می‌توان نوشت:

$$\frac{1}{m_1} |\vec{p}_1^{new}|^2 + \frac{1}{m_2} |\vec{p}_2^{new}|^2 = \frac{1}{m_1} |\vec{p}_1^{old}|^2 + \frac{1}{m_2} |\vec{p}_2^{old}|^2. \quad (3-2)$$

در این معادله  $m_1$  و  $m_2$  به ترتیب جرم ذره ۱ و ۲ می‌باشد. معادله بالا برای مشخص کردن اندازه  $\Delta\vec{P}$  کافی است.

$$\Delta\vec{p} = \frac{2m_1m_2}{m_1 + m_2} \frac{\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}}{\sigma^2} \vec{r}_{12} \quad (4-2)$$

در این رابطه  $\vec{r}_{12}$  فاصله نسبی بین ذرات ۱ و ۲ است و  $\vec{v}_{12}$  سرعت ذرات نسبت به یکدیگر می‌باشد.

برای تشریح معقول بودن این رابطه، دو حالت مرزی در نظر گرفته می‌شود. حالتی که در خط واصل دو کره برخوردها زودگذر هستند و دو کره به سختی با یکدیگر تماس دارند و ضرب نقطه‌ای  $\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}$  به صفر نزدیک می‌شود. در حالت دیگر ذرات متحمل برخورد سر به سر می‌شوند، در این

<sup>۱</sup> - Impulse

<sup>۲</sup> - Conservation of energy

صورت تکانه (با در نظر گرفتن اینکه جرم‌ها برابرند و  $|\vec{r}_{12}| = \sigma$ ) برابر است با  $\bar{p}_2 - \bar{p}_1 = \Delta \bar{p}$  و کرات، سرعت‌ها را مبادله می‌کنند [۵۶].

مدل کرات سخت، مدل ایده‌آلی از حرکت اتم‌ها یا مولکول‌ها در ظرف است و در این مدل توجه بر روی برخوردهای دو ذره‌ای معطوف می‌گردد [۵۷].

## ۲-۲- توابع توزیع

هدف اصلی در ترمودینامیک آماری محاسبه خواص ماکروسکوپی با استفاده از اطلاعات میکروسکوپی است و سعی بر این است تا چگونگی به دست آوردن اطلاعات ماکروسکوپی با استفاده از داده‌های میکروسکوپی مورد بررسی قرار گیرد. برای این منظور کمیتی به نام تابع تقسیم معرفی می‌شود که مفهوم فیزیکی آن این است که متوسط تعداد حالت‌های قابل دسترس برای سیستم را نشان می‌دهد. برای محاسبه تابع تقسیم نیاز به داشتن ترازهای انرژی است. اصولاً برای به دست آوردن ترازهای انرژی، باید تمامی اطلاعات میکروسکوپی (از قبیل انرژی جنبشی و اثرات متقابل بین مولکول‌ها) را به نحو مقتضی در معادله شرودینگر قرار داد و از حل آن ترازهای انرژی مجاز را به دست آورد. بنابراین تابع تقسیم از یک طرف به خواص میکروسکوپی مرتبط است و از طرف دیگر تمام خواص ماکروسکوپی به صورت توابعی از تابع تقسیم قابل محاسبه هستند. به عبارت دیگر، خواص ماکروسکوپی سیستم به تابع تقسیم ربط دارند. تابع تقسیم را می‌توان به صورت پل‌ی تصور کرد که یک سر آن به خواص میکروسکوپی و سر دیگر آن به خواص ماکروسکوپی متصل است. بنابراین روش کار در ترمودینامیک آماری بدین ترتیب است که با استفاده از داده‌های میکروسکوپی ابتدا تابع تقسیم و سپس با داشتن تابع تقسیم خواص ماکروسکوپی محاسبه می‌شود [۱۱]. برای اجتناب از حل معادله شرودینگر و به دست آوردن ترازهای انرژی، می‌توان از روش‌های دیگری برای محاسبه خواص ماکروسکوپی استفاده کرد. از جمله این روش‌ها استفاده از توابع توزیع است. یکی از این توابع، تابع توزیع جفت یا تابع توزیع شعاعی است که در زیر به تفصیل بیان خواهد شد.

## ۲-۲-۱- تابع توزیع شعاعی

تئوری‌های جدید سیالات و مخلوط آنها به میزان زیادی از مفهوم تابع توزیع شعاعی، RDF، بهره گرفته‌اند. تئوری‌های تابع توزیع شعاعی در توصیف رفتار مایعات ساده و مخلوط آنها کاملاً موفق بوده است [۱۳]. این تابع به‌طور کمی ساختار مایع را بر حسب احتمال یافتن یک ذره در فاصله‌ی مشخصی از ذره مرکزی در توزیع یکنواختی از ذرات بیان می‌کند. وقتی تابع توزیع شعاعی در مورد اتم‌های یک سیستم مولکولی به کار برده می‌شود، شکل بسیار پیچیده‌ای دارد. برای درک این موارد پیچیده ابتدا لازم است تابع توزیع شعاعی سیالات ساده توصیف شود [۵۸].

## ۲-۲-۱-۱- فرمول بندی تابع توزیع شعاعی

اگر سیستمی با  $N$  ذره در حجم  $V$  و دمای  $T$  را در نظر بگیریم احتمال اینکه مولکول ۱ حول  $r_1$  و المان حجم  $dr_1$  و مولکول ۲ حول  $r_2$  و المان حجم  $dr_2$  ... باشد به صورت زیر است [۱۱]:

$$P^{(N)}(r_1, \dots, r_N) dr_1 \dots dr_N = \frac{e^{-\beta U_N}}{Z_N} dr_1 \dots dr_N \quad (۵-۲)$$

در این معادله  $U_N$  پتانسیل برهم‌کنش  $N$  ذره است و  $\beta = \frac{1}{K_B T}$  (ثابت بولتزمن است) و  $Z_N$  انتگرال پیکربندی می‌باشد.

$$Z_N = \int \dots \int e^{-\beta U_N} dr_1 \dots dr_N \quad (۶-۲)$$

احتمال اینکه ذره ۱ حول  $r_1$  در المان حجم  $dr_1$  و ... ذره  $n$  حول  $r_n$  در المان حجم  $dr_n$  باشد و پیکربندی سایر ذرات هر چه که خواهد باشد، عبارت است از:

$$P^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \int \dots \int \frac{e^{-\beta U_N}}{Z_N} dr_{n+1} \dots dr_N \quad (۷-۲)$$

در واقع  $P^{(n)}$  چگالی احتمال است و از انتگرال‌گیری از طرفین معادله‌ی (۵-۲) بر روی  $r_{n+1}$  تا  $r_N$  به دست می‌آید. احتمال اینکه یکی از ذرات حول  $r_1$  در المان حجم  $dr_1$ ، یکی حول  $r_2$  در المان

حجم  $dr_2$  و ... یک ذره حول  $r_n$  در المان حجم  $dr_n$  باشد و پیکر بندی سایر مولکول‌ها هر چه که خواهد باشد، به قرار زیر است [۱۱]:

$$\rho^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \frac{N!}{(N-n)!} P^{(n)}(r_1, \dots, r_n) \quad (۸-۲)$$

که ضریب  $\frac{N!}{(N-n)!}$  تعداد راه‌های انتخاب  $n$  ذره از سیستم  $N$  ذره‌ای و توزیع آن بر اساس آنچه که گفته شد می‌باشد. مثلاً برای انتخاب اولین ذره  $N$  حق انتخاب و برای دومی  $N-1$  حق انتخاب وجود دارد.

تابع  $\rho^{(1)}(r_1)$  ساده‌ترین تابع توزیع است. کمیت  $\rho^{(1)}(r_1)dr_1$  احتمال یافتن یک مولکول حول  $r_1$  در المان حجم  $dr_1$  را نشان می‌دهد. این احتمال در جامدات تابع متناوبی است که برای محل‌های اشغال ماکزیمم بسیار تیزی دارد. اما این احتمال برای تمام نقاط درون سیال یکسان است و  $\rho^{(1)}(r_1)$  مستقل از موقعیت حجمی  $r_1$  است. بنابراین برای سیال می‌توان چنین نوشت:

$$\int \rho^{(1)}(r_1)dr_1 = \rho^{(1)} \int dr_1 = \rho^{(1)}V \quad (۹-۲)$$

اما بر اساس معادله‌ی (۸-۲) داریم:

$$\rho^{(1)} = NP^{(1)}(r_1) \quad (۱۰-۲)$$

و بر اساس معادله‌ی (۷-۲) می‌توان نوشت:

$$P^{(1)}(r_1) = \int \dots \int \frac{e^{-\beta U_N}}{Z_N} dr_2 \dots dr_N \quad (۱۱-۲)$$

چون  $P^{(1)}(r_1)$  هم مستقل از  $r_1$  است، معادله‌ی (۱۱-۲) را می‌توان چنین نوشت:

$$P^{(1)}(r_1) = \frac{1}{V} \frac{\int \dots \int e^{-\beta U_N} dr_1 \dots dr_N}{Z_N} = \frac{1}{V} \quad (۱۲-۲)$$

با قرار دادن  $P^{(1)}(r_1)$  از معادله‌ی (۱۲-۲) در معادله‌ی (۱۰-۲) نتیجه زیر حاصل می‌گردد:



$$\rho^{(1)} = \frac{N}{V} = \rho \quad (13-2)$$

به عبارت دیگر احتمال یافتن یک ذره در واحد حجم سیال با چگالی سیال برابر است. اکنون تابع همبستگی  $g^{(n)}(r_1, \dots, r_n)$  برای  $n$  ذره چنین تعریف می‌شود:

$$\rho^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \rho^n g^{(n)}(r_1, \dots, r_n) \quad (14-2)$$

اگر مولکول‌ها مستقل از یکدیگر باشند (توزیع تصادفی)  $\rho^{(n)}$  برابر  $\rho^n$  خواهد شد. بنابراین فاکتور  $g^{(n)}(r_1, \dots, r_n)$  برای تصحیح توزیع تصادفی و به عبارت دیگر برای میزان وابستگی یا همبستگی بین ذرات به کار می‌رود و به همین دلیل به تابع همبستگی معروف است. بر اساس معادلات (2-7)، (2-8) و (2-14)، تابع همبستگی چنین معرفی می‌شود [11]:

$$g^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \frac{V^n N!}{N^n (N-n)!} \frac{\int \dots \int e^{-\beta U_N} dr_{n+1} \dots dr_N}{Z_N} \quad (15-2)$$

تابع  $g^{(2)}(r_1, r_2)$  یا تابع همبستگی جفت به دلیل آنکه به طور تجربی تعیین می‌شود اهمیت زیادی در ترمودینامیک آماری دارد. در یک مایع با مولکول‌های متقارن کروی،  $g^{(2)}(r_1, r_2)$  تنها به فاصله‌ی نسبی بین مولکول‌های ۱ و ۲ یعنی  $r_{12}$  بستگی دارد. در ادامه جهت سهولت  $r_{12}$  را با  $r$  و  $g^{(2)}(r_1, r_2)$  را با  $g(r)$  نشان خواهیم داد.

احتمال مشاهده مولکول دوم در  $r$  و  $r + dr$  می‌باشد. در صورتی که یک مولکول در مبدأ وجود داشته باشد این احتمال به مقدار واحد بهنجار نمی‌شود بلکه در عوض خواهیم داشت [13 و 59]:

$$\int \rho g(r) 4\pi r^2 dr = N - 1 \cong N \quad (16-2)$$

در حقیقت این معادله نشان می‌دهد که  $\rho g(r)4\pi r^2$  تعداد مولکول‌های بین فاصله‌ی  $r$  و  $r + dr$  حول مولکول مرکزی می‌باشد. از طرف دیگر تابع  $g(r)$  به عنوان فاکتوری می‌باشد که در چگالی توده  $\rho$  ضرب می‌شود تا چگالی موضعی  $\rho(r)$  حول یک مولکول را تولید کند:

$$g(r) = \frac{\rho(r)}{\rho} \quad (17-2)$$

$g(r)$  تابع توزیع شعاعی یا RDF سیال نامیده می‌شود. زمانی که  $r \rightarrow 0$  مولکول‌ها خیلی به هم نزدیک می‌شوند و در نتیجه پتانسیل برهم‌کنش به سمت بی‌نهایت میل می‌کند. در نتیجه هنگامی که  $r \rightarrow 0$  انتظار بر این است تا  $g(r)$  به سمت صفر میل کند ( $g(r) \rightarrow 0$ ). از طرفی زمانی که  $r$  بزرگ می‌شود تأثیر مولکول‌ها بر یکدیگر کاهش می‌یابد و در حد  $r \rightarrow \infty$  آنگاه  $g(r) \rightarrow 1$  خواهد بود.

تابع توزیع شعاعی، RDF، به سه دلیل حائز اهمیت است:

۱- اگر فرض شود انرژی پتانسیل سیال به صورت جمع پذیر جفت گونه باشد، یعنی:

$$U_N(r_1, \dots, r_N) = \sum_{i>1} \sum_j u_{ij}(r_{ij}) \quad (18-2)$$

که  $u_{i,j}$  پتانسیل جفت  $i$  و  $j$  می‌باشد. در این صورت با داشتن پتانسیل جفت و RDF می‌توان کلیه خواص ترمودینامیکی سیال نظیر فشار، انرژی و پتانسیل شیمیایی و... را محاسبه کرد.

۲- نظریه‌های مبتنی بر معادلات انتگرالی بسیار توسعه یافته‌ای وجود دارند که امکان تخمین تابع توزیع شعاعی را برای یک سیال امکان پذیر می‌سازند.

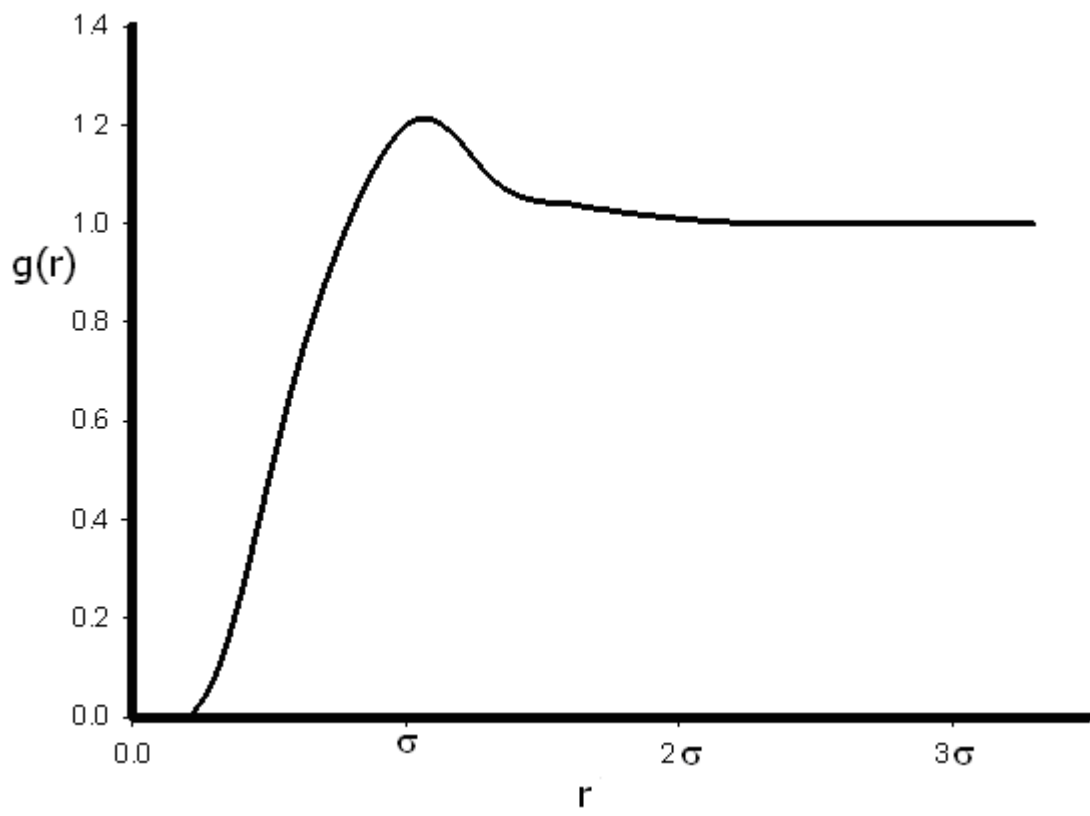
۳- تابع توزیع شعاعی به طور تجربی با استفاده از روش‌های پراش اشعه-X و پراش نوترون قابل اندازه‌گیری می‌باشد.

در شکل‌های (۱-۲) الی (۳-۲) رفتار تابع  $g(r)$  برای حالت‌های گاز، مایع و جامد نشان داده شده است که توزیع احتمال را به صورت تابعی از چگالی ماده به صورت زیر نشان می‌دهند:

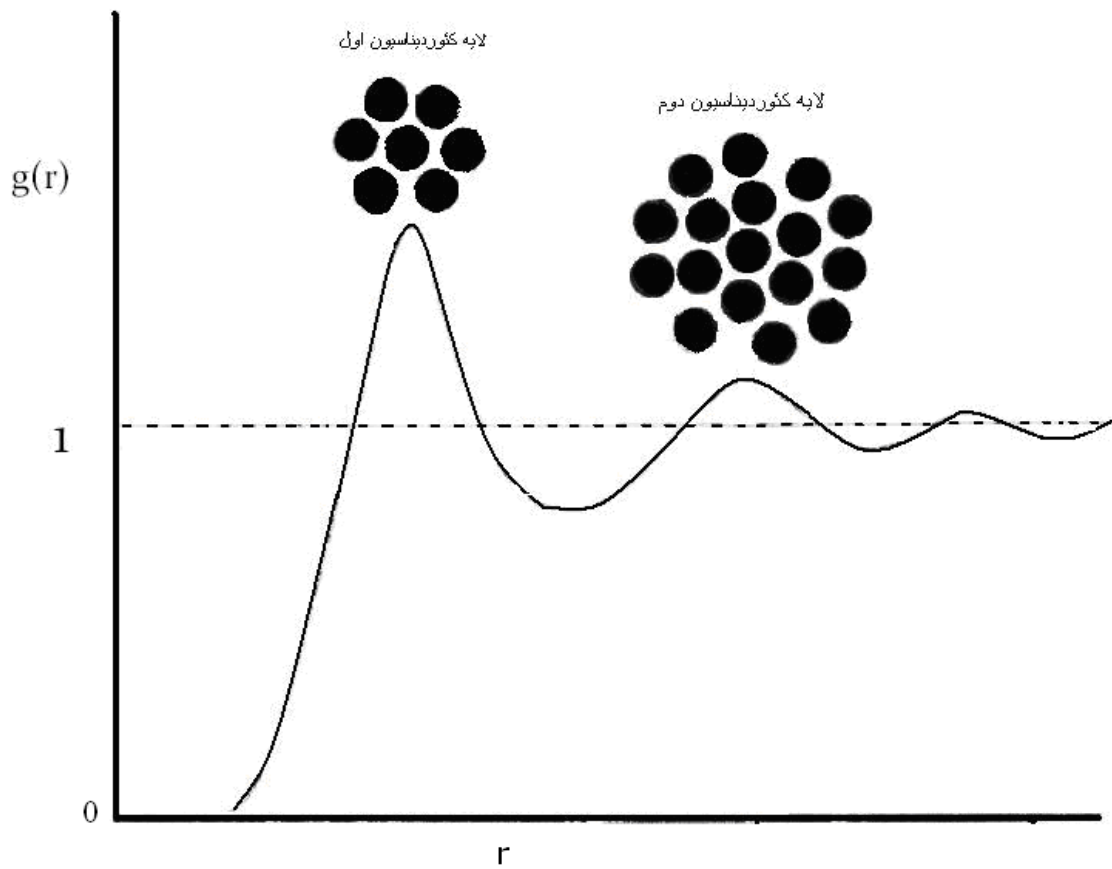
۱- برای یک گاز، ساختار بسیار کمی وجود دارد.

۲- برای یک مایع، نظم کوتاه برد وجود دارد.

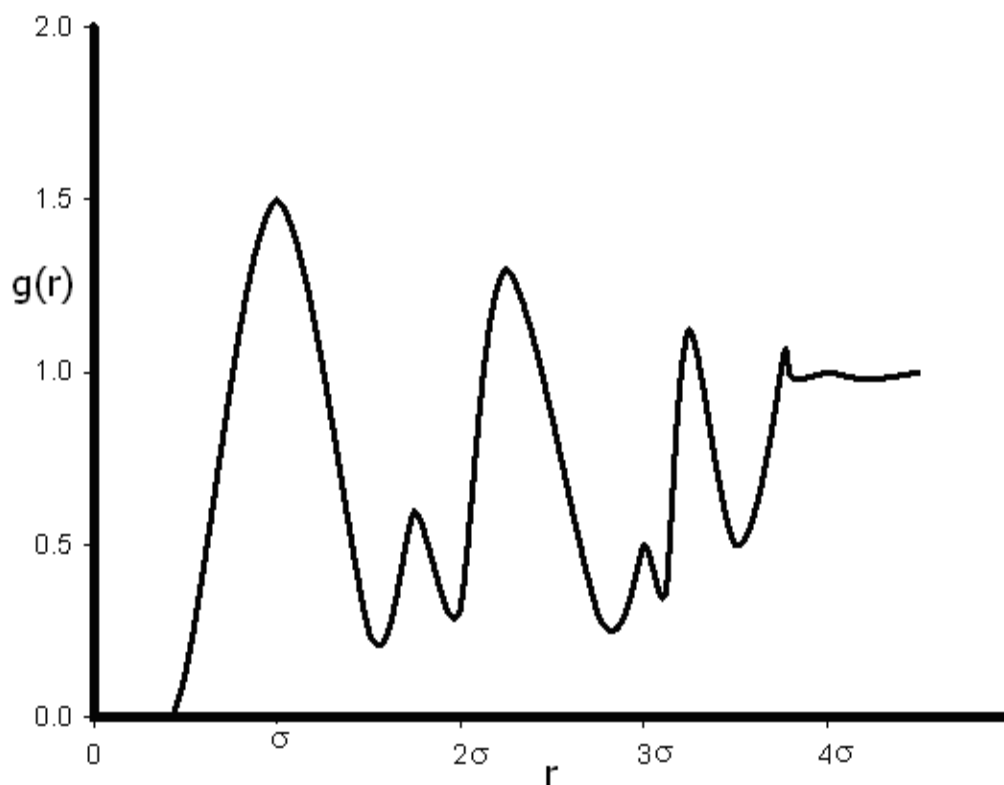
۳- برای یک بلور، نظم بلند برد وجود دارد [۱۳ و ۵۹].



شکل (۱-۲) - شکل نوعی  $g(r)$  برای حالت گاز.



شکل (۲-۲) - شکل نوعی  $g(r)$  برای حالت مایع.



شکل (۳-۲) - شکل نوعی  $g(r)$  برای یک کریستال.

## ۲-۱-۲-۲- محاسبه خواص ترمودینامیکی از طریق تابع توزیع شعاعی

همان طور که قبلاً بیان گردید با داشتن تابع توزیع شعاعی، خواص ترمودینامیکی به راحتی

تعیین می‌شوند. انرژی جنبشی سیستم،  $K$ ، بر طبق اصل همبخشی انرژی به صورت ذیل است:

$$K = \frac{3}{2} NK_B T \quad (۱۹-۲)$$

در این رابطه  $T$  دمای سیستم،  $N$  تعداد ذرات در سیستم و  $K_B$  ثابت بولتزمن است. انرژی پتانسیل سیستم،  $U$ ، نیز از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$U = 2\pi N\rho \int_0^{\infty} U(r)g(r)r^2 dr \quad (20-2)$$

انرژی درونی سیستم،  $E$ ، چنین است:

$$E = K + U \quad (21-2)$$

به منظور محاسبه‌ی آنتروپی از طریق تابع توزیع جفت، یک تقریب اضافی مورد نیاز است. با استناد به تقریب کیرک وود<sup>۱</sup> [۶۱ و ۶۰] آنتروپی،  $S$ ، عبارت است از [۶۱ و ۶۰]:

$$S = NK_B \left[ \frac{3}{2} - \ln(\rho\Lambda^3) \right] - NK_B \rho 2\pi \int_0^{\infty} g(r) \ln[g(r)] r^2 dr - \int_0^{\infty} (g(r) - 1) r^2 dr \quad (22-2)$$

که  $\Lambda$  طول موج دوبروی گرمایی است [۱۳].

خصوصیات ترمودینامیکی دیگری نیز وجود دارند که برای ما جالب توجه هستند، شامل

ظرفیت گرمایی در حجم ثابت سیستم که از رابطه ذیل محاسبه می‌شود:

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right) = \frac{3}{2} NK_B + 2\pi N\rho \int_0^{\infty} U(r) \left( \frac{\partial g(r)}{\partial T} \right) r^2 dr \quad (23-2)$$

از مطالعات ترمودینامیک کلاسیک می‌توان تغییر در آنتروپی را به صورت زیر به دست آورد:

$$\Delta S = S(T_2) - S(T_1) = \int \frac{C_V}{T} dT \quad (24-2)$$

معادلات (۲۲-۲) و (۲۴-۲) دو راه مختلف برای مقایسه تغییر آنتروپی با تغییر دما را به دست

می‌دهند. در معادله (۲۲-۲) از تقریب کیرک وود استفاده شده است در حالیکه معادله (۲۴-۲)

---

<sup>۱</sup> - Kirkwood

این تقریب را ندارد. بنابراین، با محاسبه  $g(r)$  و مقایسه این دو معادله، روشی برای تعیین میزان خطای وابسته به تقریب کیرک وود به دست می‌آید [۱۳ و ۶۲ و ۶۳].

فشار نیز کمیتی است که در ترمودینامیک اهمیت ویژه‌ای دارد. این کمیت را نیز می‌توان از فرض جمع پذیری جفت گونه بر حسب تابع همبستگی جفت به دست آورد.

$$\frac{P}{\rho K_B T} = 1 - \frac{\rho}{6K_B T} \int_0^{\infty} g(r) \frac{\partial U(r)}{\partial r} 4\pi r^3 dr \quad (2-25)$$

با داشتن انرژی پتانسیل و فشار می‌توان سایر کمیت‌های ترمودینامیکی را نیز به دست آورد. نتایج نشان می‌دهند که مقادیر محاسبه شده برای پتانسیل متوسط با مقادیر تجربی توافق بهتری از فشار دارند [۷]. این اختلاف را می‌توان بر اساس معادله (۲-۲۵) و رفتار عبارت  $g(r) \frac{\partial U(r)}{\partial r}$  در این انتگرال توجیه کرد. تابع زیر انتگرال،  $g(r) \frac{\partial U(r)}{\partial r}$ ، از دو ناحیه مثبت و منفی تشکیل شده است. در فواصل کوچک این تابع منفی است و به تغییرات کوچک در پارامترهای پتانسیل بین مولکولی  $\epsilon$  و  $\sigma$  و یا تابع همبستگی جفت بسیار حساس است، اما منطقه مثبت که در فواصل بزرگتر  $r > \sigma$  وجود دارد نسبت به این تغییرات خیلی حساس نیست. این تغییر به دلیل این است که سهم عمده‌ی انرژی پتانسیل متوسط از منطقه مثبت عبارت زیر انتگرال معادله (۲-۲۵) به دست می‌آید که این منطقه به تغییرات کوچک خیلی حساس نیست، بنابراین مقادیر محاسبه شده  $U$  با نتایج تجربی مطابقت بیشتری دارد. به همین دلیل فشار آزمون خوبی برای اطمینان از مقادیر پارامترهای بین مولکولی پتانسیل جفت یا خود تابع  $g(r)$  است. زیرا  $\frac{dU(r)}{dr}$  در مجاورت پیک اول  $g(r)$  تغییرات زیادی دارد. بنابراین خطاهای کوچک در تخمین موقعیت پیک اول  $g(r)$  یا انتخاب مدل پتانسیل جفت، خطاهای قابل ملاحظه‌ای را در فشار به همراه دارد.



کمیت دیگری که اهمیت زیادی در ترمودینامیک آماری دارد، فاکتور تراکم پذیری همدما،  $k_T$ ، است که با استفاده از تابع توزیع شعاعی جفت و بدون فرض جمع پذیری جفت گونه به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$k_T = \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{\rho K_B T} + \frac{4\pi}{\rho K_B T} \int_0^{\infty} (g(r) - 1) r^2 dr \quad (26-2)$$

که عبارت  $(g(r) - 1)$ ، تابع همبستگی کل،  $h(r)$ ، است که قبلاً تعریف شده است. بدیهی است که در گازهایی که  $g(r) = 1$  است معادله  $k_T$  به تراکم پذیری همدمای گاز ایده‌آل تبدیل می‌شود [۷]:

$$k_T = \frac{1}{\rho K_B T} \quad (27-2)$$

بدین ترتیب می‌توان نشان داد که تمام خواص ترمودینامیکی سیال چگال با استفاده از تابع توزیع شعاعی جفت قابل تعیین هستند.

تابع  $g(r)$  خود به سه روش تعیین می‌شود:

۱- روش‌های تجربی مبتنی بر آزمایشات پراکندگی اشعه‌ی X و تابش نوترونی

۲- روش‌های نظری مبتنی بر حل معادلات انتگرالی

۳- روش‌های مختلف شبیه سازی

به دلیل وابستگی این تابع به دما و چگالی برای محاسبه‌ی خواص ترمودینامیکی سیال به روش تجربی باید در هر دما و چگالی آزمایش مستقلی انجام داد که مقرون به صرفه نیست. از طرفی روش‌های شبیه سازی به دلیل حجم زیاد محاسبات به زمان طولانی نیاز دارند. ولی روش‌های مبتنی بر حل معادلات انتگرالی سریع‌ترین روش برای به دست آوردن  $g(r)$  هستند [۶۵و۶۴].

داشتن عبارت تحلیلی برای تابع توزیع شعاعی، تا حد زیادی از پیچیدگی‌های این روش می‌کاهد. ارائه عبارت تحلیلی برای تابع توزیع شعاعی کار ساده‌ای نیست، ولی تلاش‌های زیادی در این زمینه انجام گرفته است [۶۵ و ۶۴].

البته با توجه به محدودیت تعیین تابع توزیع شعاعی، به ویژه در نواحی بحرانی و انتقال فاز و معتبر نبودن فرض جمع پذیری پتانسیل پیکربندی در چگالی‌های بالا، می‌توان برای محاسبه خواص ترمودینامیکی سیالات چگال از تابع توزیع دیگری استفاده کرد. تابع همبستگی مستقیم از جمله این توابع توزیع است و در نظریه سیالات چگال اهمیت خاصی دارد که در قسمت بعدی به طور کامل معرفی می‌شود.

## ۲-۲-۲- تابع همبستگی مستقیم

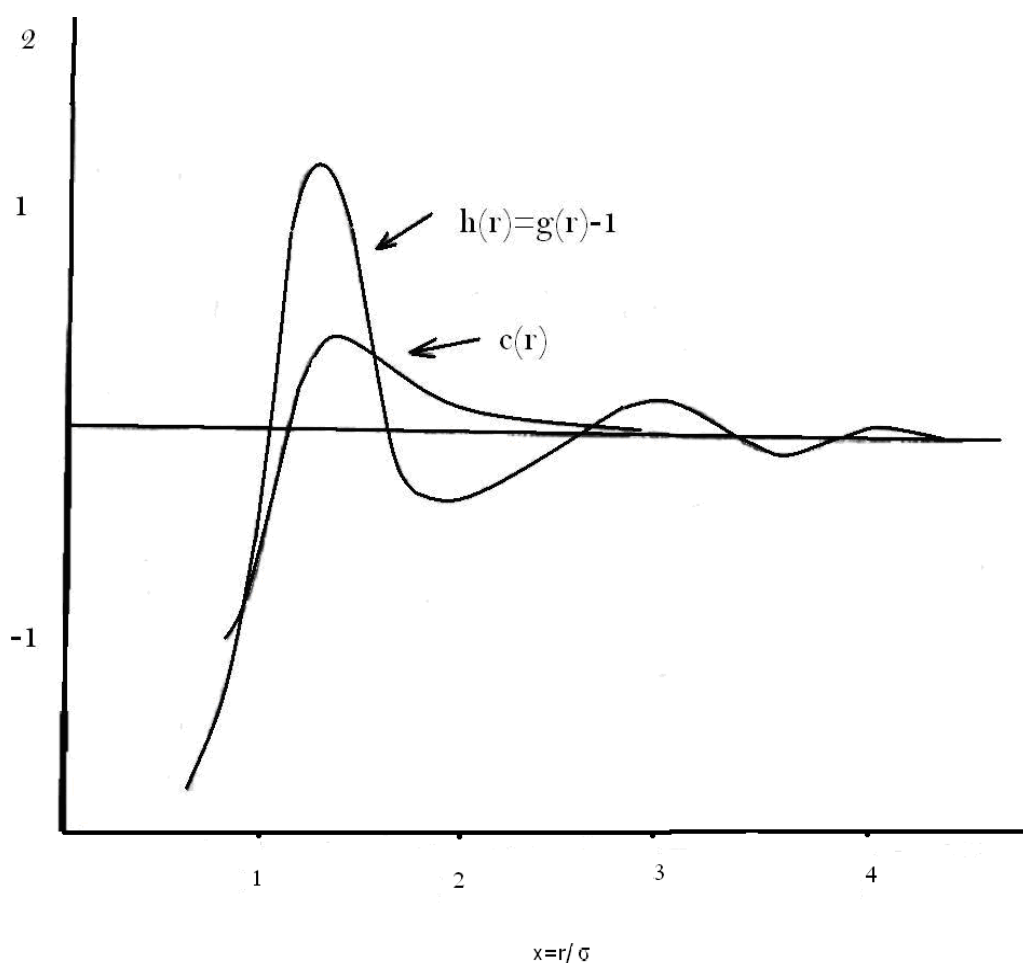
تابع همبستگی مستقیم که با  $c(r)$ ، نشان داده می‌شود تابع مهمی در تئوری ساختار مایعات است و توسط تعداد زیادی از محققین مطالعه شده است [۶۷ و ۶۶]. تابع همبستگی مستقیم، DCF، با تابع همبستگی جفت کل،  $h(r)$ ، در ارتباط است که به وسیله آزمایشات مختلف و شبیه سازی‌های کامپیوتری اندازه‌گیری می‌شود و در مرکز نظریه‌های تابعی چگالی مدرن قرار دارد [۶۷ و ۶۶].

تابع همبستگی کل،  $h(r)$ ، اثر کلی مولکول ۱ بر مولکول ۲ را در فاصله  $r$  نشان می‌دهد و در صورتی که  $r \rightarrow \infty$ ،  $h(r)$  صفر می‌شود که در این فاصله هیچ همبستگی بین دو ذره ۱ و ۲ وجود ندارد. برای سیالات کروی نرمال در یک حالت ترمودینامیکی یکسان هر دو تابع  $[h(r), c(r)]$  تنها به فاصله وابسته‌اند و ممکن است با استفاده از معادله اورنشین-زرنیک به یکدیگر مربوط شوند [۲۱ و ۶۸]. معادله OZ به این صورت بیان می‌شود:

$$h(r_{12}) = c(r_{12}) + \rho \int h(r_{23})c(r_{13})dr_3 \quad (2-28)$$

که جمله اول همبستگی مستقیم بین ذره ۱ و ۲ و دومین جمله سهم غیر مستقیم را شامل می‌شود. اصولاً این معادله توصیف تابع همبستگی مستقیم،  $c(r)$ ، بر حسب تابع همبستگی

کل،  $h(r)$ ، است. گستره‌ی همبستگی مستقیم  $c(r)$  همانند پتانسیل جفت است. این تابع نسبتاً سریع به صفر میل می‌کند اما رفتار غیر صفر را تا فواصل متناسب با گستره‌ی پتانسیل از خود نشان می‌دهد. این تابع نسبت به  $h(r)$  کوتاه برد می‌باشد.  $h(r)$  نوساناتی به دلیل همبستگی‌های غیر مستقیم نشان می‌دهد [۱۳]. در شکل (۲-۴) رفتار کلی  $c(r)$  و  $h(r)$  نمایش داده شده است.



شکل (۲-۴) - مقایسه رفتار توابع  $c(r)$  و  $h(r)$  برای یک سیال نوعی [۱۳].

در معادله OZ تابع همبستگی کل بین مولکول ۱ و ۲ به دو سهم تقسیم می‌شود.

۱- اثر مستقیم مولکول ۱ بر مولکول ۲ که کوتاه برد است.

۲- اثر غیر مستقیم مولکول ۱ بر مولکول ۲ که به واسطه حضور مولکول‌های دیگر صورت می‌گیرد. برای یک گاز رقیق تمام اثرات غیر مستقیم به صفر کاهش می‌یابد و تابع همبستگی کل به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$h(r) = c(r) = \exp(-\beta\phi(r)) - 1 \quad (29-2)$$

که  $\beta = \frac{1}{K_B T}$  و  $\phi(r)$  پتانسیل جفت منزوی است.

تابع  $c(r)$  همیشه کوتاه برد است حتی در ناحیه بحرانی که در آن  $h(r)$  تابع بلند برد است و بر خلاف تابع همبستگی کل، تابع همبستگی مستقیم افت و خیزی ندارد و نیز به دست آوردن خواص ترمودینامیکی به وسیله تابع همبستگی مستقیم بدون استفاده از تقریب جمع پذیر جفت گونه برای انتگرال پیکربندی، که تقریب اصلی در تئوری‌هایی است که اساس آنها تابع همبستگی جفت،  $g(r)$  است، ممکن شده است. علی‌رغم فواید یاد شده، تفسیر فیزیکی ساده‌ای برای تابع همبستگی مستقیم مطابق آنچه برای  $g(r)$  بیان می‌شود ارائه نشده است.

بهرحال واضح است زمانی که  $r$  به سمت بی‌نهایت میل می‌کند، تابع همبستگی مستقیم به صفر نزدیک می‌شود و زمانی که  $r$  به سمت صفر میل می‌کند، این تابع با شیب تندی کاهش می‌یابد [۲۳].

تابع همبستگی مستقیم در نظریه سیالات چگال اهمیت بسزایی دارد. به طوری که با تعیین معادله  $c(r)$  و با استفاده از معادله OZ، تعیین ساختار خواص ترمودینامیکی سیال امکان پذیر است. از این رو علاوه بر روش‌های تجربی و شبیه‌سازی برای تعیین  $c(r)$ ، روش‌های نظری مبتنی بر معادلات انتگرالی برای تعیین آن به کار می‌رود [۲۸ و ۲۹].

از مهمترین این معادلات می‌توان به تقریب پرکاش-ایویک و هایپرنتد چین اشاره کرد که در قسمت بعدی توضیح داده خواهند شد.

## ۲-۳- تقریب HNC<sub>3</sub> PY

راش بروک<sup>۱</sup> و اسکوینز<sup>۲</sup> [۷] نشان دادند که تابع همبستگی مستقیم می‌تواند به صورت بسط چند جمله‌ای<sup>۳</sup> بر حسب چگالی نوشته شود [۷].

$$c(r_{12}) = \sum_n a_{n+1}(r_{12}) \rho^{n-1} \quad (۳۰-۲)$$

که ضرایب بسط،  $a_{n+1}(r_{12})$ ، عبارت‌اند از:

$$a_{n+1}(r_{12}) = \frac{1}{(n-1)!} \int \dots \int \sum_{i>j}^N \prod f(ij) dr_3 \dots dr_{N-1} \quad (۳۱-۲)$$

ضریب  $a_2$  که تابع  $f$ -مایر،  $a_2(r_{12}) = f(r_{12})$ ، است جمله اصلی را در بسط فوق تشکیل می‌دهد. ضریب  $a_3(r)$  نیز بر حسب توابع  $f$ -مایر،  $f(ij)$ ، عبارت است از [۷]:

$$a_3(r_{12}) = \int f(r_{12}) f(r_{23}) f(r_{13}) dr_3 \quad (۳۲-۲)$$

با استفاده از یک روش تصویری می‌توان عبارت زیر انتگرال را به سهولت بر حسب توابع  $f$ -مایر نوشت. تابع  $f_{ij}$ -مایر را با اتصال دو دایره به یکدیگر نشان می‌دهیم. چنین نمودارهایی به نمودارهای خوشه‌ای موسوم‌اند. [۱۱].

در نهایت با استفاده از این نمودارهای خوشه‌ای بسط بروک-اسکوینز، معادله‌ی (۳۰-۲) به صورت زیر نشان داده می‌شود [۷]:

$$c(r) = +[\rho \text{ (line)} + \rho \text{ (triangle)}] + \frac{\rho^2}{2} [2 \text{ (square)} + \dots] \quad (۳۳-۲)$$

<sup>۱</sup>- Rushbrooke

<sup>۲</sup>-Scoinse

<sup>۳</sup>-Polynomial

عبارت  $c(r)$  به صورت این بسط ساده به نظر می‌رسد اما از آن نمی‌توان برای تعیین  $h(r)$  در معادله OZ استفاده کرد، زیرا دارای جملات نامحدودی است. در واقع اگر عبارت تحلیلی  $c(r)$  یا فرمول بسته بسط را بدانیم، آنگاه می‌توان به کمک آن فاکتور ساختار سیال و خواص ترمودینامیکی را به دست آورد [۶۹و۲۴].

جملات یا دیاگرام‌های بسط (۲-۳۳) دارای ویژگی‌های مشترکی هستند که می‌توان آنها را به چند دسته اصلی تقسیم نمود. مطابق با تقسیم بندی انواع نمودارهای جدول (۲-۱) نظیر نمودارهای  $C(r), B(r), E(r)$ ، می‌توان توابع همبستگی را مستقیماً به صورت ترکیب خطی از نمودارهای فوق نوشت [۷]:

$$h(r) = C(r) + B(r) + E(r) \quad (۲-۳۴)$$

$$c(r) = B(r) + E(r) \quad (۲-۳۵)$$

و

$$\frac{\Phi(r) - \phi(r)}{K_B T} = C(r) + E(r) \quad (۲-۳۶)$$

که عبارت تحلیلی تابع همبستگی مستقیم،  $c(r)$ ، نیز از ترکیب معادلات (۲-۳۴) تا (۲-۳۶) به این صورت به دست می‌آید [۷]:

$$c(r) = g(r) - 1 - \ln g(r) - \frac{\phi(r)}{K_B T} + E(r) \quad (۲-۳۷)$$

بنابراین با استفاده از معادله (۲-۳۷) در معادله OZ می‌توان تابع همبستگی کل را به طور صحیح تعیین کرد. ولی مشکل اصلی در این است که تا کنون هیچ عبارت تحلیلی برای نمودارهای  $E(r)$  ارائه نشده است [۷].

معادله (۲-۳۵) به صورت ساده زیر بیان می‌شود:

$$c = B + E \quad (۲-۳۸)$$

و یا بر اساس نمودارهای مختلف در جدول (۲-۱) می توان چنین نوشت:

$$c = f(1 + C + B' + E) + B' + E \quad (۲-۳۹)$$

حاصلضرب تابع  $f$ -مایر در هر یک از توابع  $C, B', E$  آنها را به نمودارهای نوع  $B$  تبدیل می کند  
یعنی:

$$f.C \rightarrow B, \quad f.E \rightarrow B, \quad f.B' \rightarrow B \quad (۲-۴۰)$$

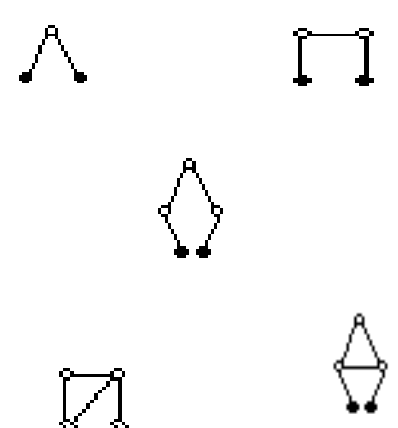
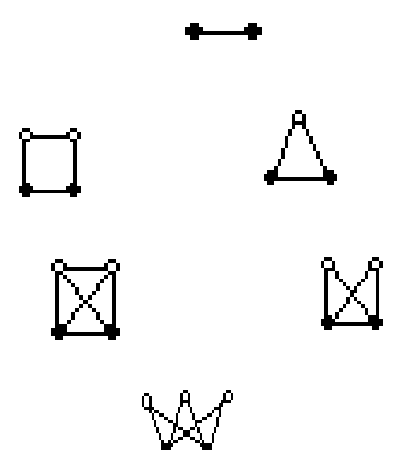

با توجه به برد توابع  $f, 1+f$  می توان تابع  $c(r)$  را به صورت ترکیبی از سهم برد بلند و سهم برد کوتاه به صورت زیر در نظر گرفت:

$$c = f(1 + C) + (1 + f)(B' + E) \quad (۲-۴۱)$$

که جمله اول عبارت سمت راست معادله ی (۲-۴۱) سهم کوتاه برد تابع همبستگی مستقیم و جمله دوم سهم بلند برد آن را نشان می دهد [۷].

در تقریب های پرنند چین، HCN، از جمله مشکل زای  $E(r)$  در عبارت اصلی  $c(r)$ ، معادله ی (۲-۳۷) صرف نظر می شود [۲۸].

جدول (۱-۲) - طبقه بندی انواع خوشه‌های مولکولی در بسط نموداری تابع  $c(r)$  (معادله ۲-۳۳) [۷].

	<p>زنجیره‌های <math>C(r)</math>: خوشه‌های با حداقل یک نقطه گرهی (۰).</p> <p>زنجیر ساده: نمودارهایی که با برداشتن هر نقطه گرهی از آن به دو قسمت که هر کدام دارای یکی از دو ذره ۱ و ۲ است (●) تقسیم می‌شود.</p> <p>زنجیر شبکه‌ای: با بیش از یک اتصال عرضی.</p>
	<p>مجموعه‌های <math>B(r)</math>: خوشه‌هایی که دارای مجموعه اتصال‌های موازی بین ذره ۱ و ۲ هستند.</p> <p>خوشه‌های <math>B(r)</math>: گروهی از مجموعه‌های <math>B(r)</math> که اتصال مستقیم بین ذره ۱ و ۲ وجود ندارد.</p>
	<p>خوشه‌های پایه‌ای <math>E(r)</math>: نمودارهایی که نه زنجیری هستند و نه به صورت مجموعه‌های <math>B(r)</math> می‌باشند.</p>



$$c_{HCN}(r) = g(r) - 1 - \ln g(r) - \frac{\phi(r)}{K_B T} \quad (42-2)$$

که بر اساس سهم برد بلند،  $f+1$ ، و سهم برد کوتاه،  $f$ ، می‌توان آن را به صورت زیر نوآرایی کرد:

$$c_{HCN} = f(1+C+E) + (1+f)B' \quad (43-2)$$

بنابراین تقریب HCN برای تابع  $c(r)$ ، هم در قسمت مغزی و هم در قسمت دنباله با عبارت اصلی آن، معادله‌ی (۴۱-۲) تفاوت دارد.

اما در تقریب PY برای تابع  $c(r)$ ، از مؤلفه برد بلند،  $(1+f)(B'+E)$ ، در معادله‌ی (۴۱-۲) به طور کامل صرف نظر می‌شود در صورتی که سهم کوتاه برد آن بدون تغییر حفظ می‌شود [۲۹]:

$$c_{PY} = f(1+C) \quad (44-2)$$

مزیت معادله PY در این است که به طور تحلیلی برای سیستم کرات سخت قابل حل است. در سیالات کرات سخت، سهم دنباله  $c(r)$  بسیار کوچک است در حالی که سهم مغزی آن فقط به چگالی بستگی دارد که با افزایش چگالی سهم مغزی نیز افزایش می‌یابد [۲۹]. حل دقیق معادله PY برای سیال کرات سخت منجر به عبارت زیر می‌گردد:

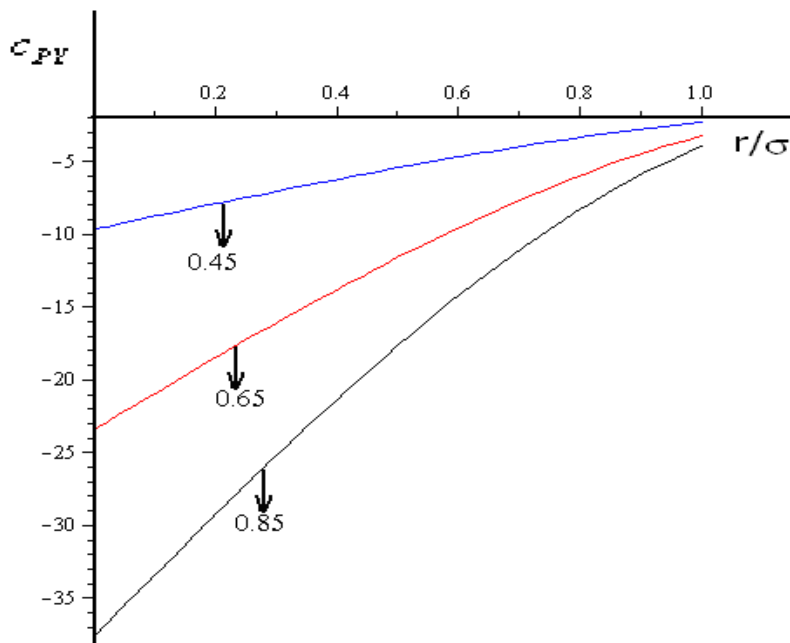
$$c_{PY} = -a - b\left(\frac{r}{\sigma}\right) - c\left(\frac{r}{\sigma}\right)^3 \quad (45-2)$$

که  $a, b, c$  به صورت ذیل معرفی می‌شوند:

$$a = \frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4}, \quad b = -6\eta \frac{(1+\frac{1}{2}\eta)^2}{(1-\eta)^4}, \quad c = \frac{\eta a}{2} \quad (46-2)$$

که  $\eta = \frac{1}{6}\pi\rho\sigma^3$  است.

رفتار  $c_{PY}$  در چندین چگالی کاهش یافته سیال کره‌ی سخت در شکل (۵-۲) رسم شده است. مطابق با شکل، تابع  $c_{PY}$  برای سیال کره‌ی سخت تنها دارای سهم مغزی است که با افزایش چگالی، مقدار آن افزایش می‌یابد. با داشتن  $c(r)$  می‌توان تمام خواص ترمودینامیکی و همچنین فاکتور ساختار سیال کره‌ی سخت را محاسبه کرد.



شکل (۵-۲) - تغییرات تابع همبستگی مستقیم  $c_{PY}$  برای سیال کرات سخت بر حسب چگالی کاهش یافته که با اعداد بر روی نمودارها مشخص شده‌اند.

معادله حالت برای سیستم کرات سخت با استفاده از تقریب PY به این صورت است [۲۹].

$$\frac{P}{\rho K_B T} = \frac{1 + 2\eta + 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} \quad (۴۷-۲)$$

اهمیت سیال کرات سخت از آنجا ناشی می‌شود که نتایج حاصل از محاسبات شبیه سازی و دینامیک مولکولی نشان می‌دهد ساختار سیال واقعی در چگالی‌های بالا به ساختار سیال کرات سخت بسیار شبیه است [۷۰ و ۷۱].

چون در سیال کرات سخت فقط نیروهای دافعه وجود دارند، می‌توان نتیجه گرفت که در سیالات واقعی نیز نیروهای دافعه نقش اصلی را در ساختار سیال به عهده دارند و نیروهای جاذبه در این سیالات فقط موجب می‌شود تا مولکول‌ها در کنار هم قرار بگیرند و در واقع حجم سیال را مشخص می‌کنند.

تقریب PY که در آن از سهم نیروهای جاذبه بلند برد صرف نظر شده است، نمی‌تواند سیالات واقعی متراکم را به خوبی توصیف کند. تقریب HNC نیز به دلیل آن که شکل غیر صحیحی از سهم

کوتاه برد و سهم بلند برد تابع  $c(r)$  را شامل می‌شود هرگز نمی‌تواند خواص ترمودینامیکی ناشی از سهم بلند برد تابع  $c(r)$  را به طور صحیح نشان دهد. از طرفی چون قسمت مغزی این تابع در تقریب HNC نیز کامل نمی‌باشد بنابراین هرگز سیستم‌هایی با چگالی بالا و دمای بالا را به خوبی توصیف نمی‌کند [۷].

اگرچه در دما و چگالی بالا ساختار سیال چگال و سیال کرات سخت بسیار به یکدیگر نزدیک می‌گردد اما تفاوت این دو را باید در نظر داشت. در سیال کرات سخت نیروهای دافعه شیب نامحدودی دارند و نیروهای جاذبه نیز وجود ندارند. حال آنکه شیب نیروی دافعه در سیال چگال واقعی هر چند تند است اما نامحدود نیست. هر چه دما و چگالی کاهش یابد تفاوت بین سیال کرات سخت و سیال چگال واقعی بیشتر می‌شود و به همین دلیل نتایج حاصل از نظریه‌های کرات سخت نظیر PY ضعیف‌تر می‌گردد. بنابراین برای به دست آوردن نتایج قابل قبول بر اساس نظریه‌های فوق باید تصحیحاتی انجام شود. این موضوع اساس نظریه‌های اختلال را تشکیل می‌دهد که در قسمت بعدی به تفصیل بیان خواهد شد.

## ۲-۴- نظریه اختلال

تا زمانی که مکانیک آماری ابزاری قوی برای خواص تعادلی سیالات خالص و مخلوط ارائه می‌دهد، نظریه اختلال تنها زمانی که با برخی از مدل‌های فیزیکی ترکیب شود مفید خواهد بود. همانطور که مکانیک آماری بین خواص میکروسکوپی و ماکروسکوپی پیوستگی ایجاد می‌کند اگر بتوان برخی روابط کمی مربوط به خواص اجتماع کوچکی از مولکول‌ها ایجاد نمود، آنگاه مکانیک آماری روشی را برای توسعه و گسترش مقایسه این روابط جهت کاربرد آنها به تعداد خیلی زیادی از مولکول‌ها ایجاد می‌نماید. در این صورت روابطی که مقیاس آنها توسعه یافته است می‌توانند جهت ارزیابی ترمودینامیکی متداول که در آزمایشات نمونه اندازه‌گیری شده‌اند به کار روند.

چون فهم فیزیکی رضایت بخشی از سیالات چگال وجود ندارد نمی‌توان نظریه دقیق و رضایت بخشی برای سیالات چگال (به استثناء حالت‌های خیلی ساده) به وجود آورد. این مشکل ناشی از نارسائی مکانیک آماری نیست بلکه از کافی نبودن علم ساختار سیالات و نیروهای بین مولکولی است. روش متداول این است که برای برطرف کردن این مشکل، ابتدا مطالعات بر روی برخی خواص سیال چگال ایده‌آل متمرکز شده و سپس خواص سیال چگال واقعی به بیان خواص سیال ایده‌آل مرتبط گردد. این روش اساس نظریه اختلال را تشکیل می‌دهد [۷۳].

همانطور که می‌دانیم انرژی هلمهولتز آرایشی یک سیال به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$A = -K_B T \ln \int e^{-\frac{\phi}{K_B T}} dr_1 \dots dr_N \quad (۴۸-۲)$$

که  $\phi$  انرژی پتانسیل کل سیال،  $K_B$  ثابت بولتزمن و  $r_1$  موقعیت مولکول ۱ و غیره می‌باشد.

اگر  $A$  به صورت یک سری توانی از برخی پارامترهای اختلال  $\lambda$ ، در درجه حرارت و چگالی ثابت بسط داده شود آنگاه:

$$A_\lambda = A_0 + A_1 + A_2 + \dots \quad (۴۹-۲)$$

که  $A_0$  انرژی هلمهولتز مربوط به سیستم مرجع می‌باشد.

$$A_1 = \left( \frac{\partial A}{\partial \lambda} \right)_{\lambda=0} \lambda \quad (۵۰-۲)$$

$$A_2 = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 A}{\partial \lambda^2} \right)_{\lambda=0} \lambda^2 \quad (۵۱-۲)$$

که پارامتر اختلال  $\lambda$  توسط انرژی پتانسیل  $\phi$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\phi_\lambda = \phi_0 + \lambda \phi_P \quad (۵۲-۲)$$

و زیر نویس  $P$  به اختلال اشاره دارد. در این جا  $\phi_0$  پتانسیل مرجع و  $\phi_P$  پتانسیل اختلال می‌باشد به

طوری که وقتی که  $\lambda = 1$  است،  $\phi_\lambda$  پتانسیل سیال واقعی است [۷۳].

نظریه ویک-چندلر-اندرسون<sup>۱</sup> [۷۳] (WCA) که مبتنی بر روش اختلال است، برای بهبود نتایج در نواحی مختلف از دما و چگالی، سیستم مرجع را اصلاح می‌کند. در نظریه WCA به جای استفاده از سیال کرات سخت با قطر مولکولی  $\sigma$  برای سیستم مرجع، از سیال کرات سخت با قطر مولکولی معادل،  $r_0$ ، استفاده می‌کنند. قطر مولکولی  $r_0$  بر خلاف  $\sigma$  به دما و چگالی بستگی دارد که در هر دما و چگالی قابل محاسبه می‌باشد [۷۳]. بر اساس تئوری اختلال انرژی پتانسیل به دو قسمت مرجع و اختلال تقسیم می‌شود:

$$\phi(r) = \phi_0(r) + \phi_1(r) \quad (۵۳-۲)$$

با استفاده از نظریه WCA قسمت مرجع و قسمت اختلال به این صورت نوشته می‌شوند [۷۳]:

$$\phi_0(r) = \begin{cases} \phi(r) - \phi(r_0) & r \leq r_0 \\ 0 & r > r_0 \end{cases} \quad (۵۴-۲)$$

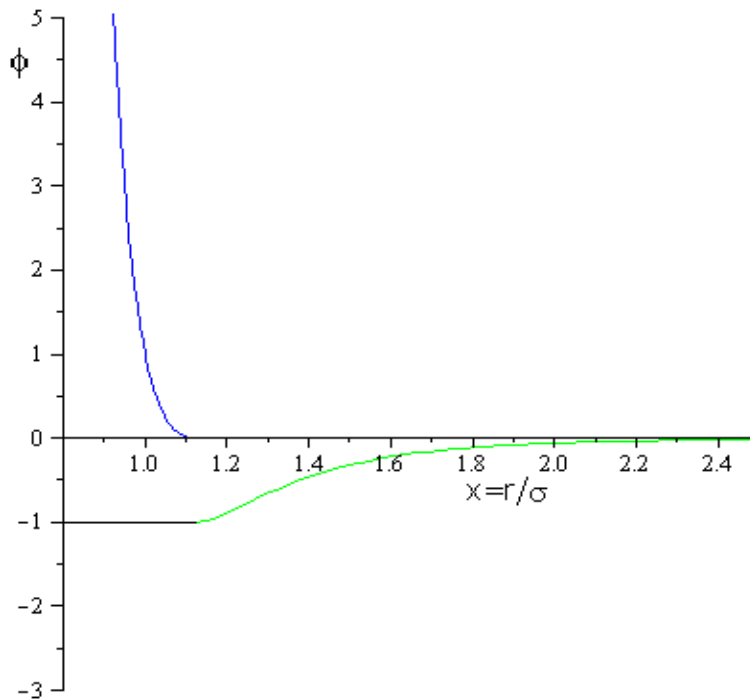
و

$$\phi_1(r) = \begin{cases} \phi(r_0) & r \leq r_0 \\ \phi(r) & r > r_0 \end{cases} \quad (۵۵-۲)$$

که  $\phi(r_0)$  نخستین مینیمم  $\phi(r)$  است. با استفاده از این نظریه تابع انرژی پتانسیل در شکل (۶-۲) رسم شده است.

---

<sup>۱</sup> - Week-Chandler-Anderson



شکل (۲-۶) - رسم منحنی پتانسیل با استفاده از روش WCA.

این تغییر سیستم مرجع موجب می‌شود که دافعه سخت<sup>۱</sup> سیال کرات سخت متناسب با شرایط ترمودینامیکی سیستم تغییر نماید (یا به عبارتی دافعه نرم<sup>۲</sup> می‌شود). سایر نظریات سیال چگال که مبتنی بر روش اختلال هستند برای بهبود نتایج خود با استفاده از سیال مرجع با دافعه نرم، سهم عبارات بالاتر بسط، معادله‌ی (۲-۴۹) را در نظر می‌گیرند یا شکل مناسب‌تری از عامل اختلال را به کار می‌برند. یکی از راه‌کارهایی که برای بررسی صحت مدل‌های به کار رفته مورد استفاده قرار می‌گیرد پیش بینی رفتار فاکتور ساختار سیال می‌باشد. از این رو برای توصیف نظریه‌های فوق به توصیف فاکتور ساختار سیال،  $S(k)$ ، نیاز است که در زیر به آن اشاره شده است.

## ۲-۵ - فاکتور ساختار

فاکتور ساختار کمیتی اساسی است که همبستگی‌های میان ذرات سیال از آن قابل استخراج است [۷۴]. یکی از خصوصیات مهمی که یک مایع را مشخص می‌کند فاکتور ساختار،  $S(k)$ ، آن است

<sup>۱</sup> - Hard repulsion  
<sup>۲</sup> - Soft repulsion

که اندازه همبستگی‌های بین ذره‌ای در فضای دو جانبه می‌باشد. دانش دقیق از این کمیت برای مطالعه خواص انتقالی و ترمودینامیکی هر سیستم سیال ضروری است. رابطه بین پتانسیل درون اتمی و فاکتور ساختار،  $S(k)$ ، فلزات مایع به طور پیوسته یک موضوع مورد توجه بوده است. فاکتور ساختار استاتیک به طور تجربی با استفاده از تکنیک‌های پراش اشعه- $X$  و نوترونی اندازه‌گیری می‌شود [۷۶ و ۷۵].

این آزمایشات اطلاعات ساختاری مستقیمی در مورد نظم و نحوه آرایش مولکولی در سیالات ارائه می‌کنند [۷]. طول موج اشعه- $X$  مورد استفاده در این آزمایشات از مرتبه ابعاد مولکولی است که در نتیجه یک پراکندگی مستقل با هر ذره حاصل می‌شود. امواج پراکنده شده از ذرات مختلف نیز می‌توانند با یکدیگر تداخل نمایند.

بنابراین توزیع شدت پراکندگی در فواصل دور از مرکز پراش دارای دو سهم کاملاً متمایز است. یکی پراکندگی مستقل از  $N$  که با شدت پراکندگی زمینه،  $I_0$ ، مشخص می‌شود و دیگری اثرات تداخلی بین امواج پراکنده شده است. امواج تداخلی به پیکربندی ذرات سازنده سیستم وابسته است که شدت پراکندگی زمینه،  $I_0$  را تعدیل می‌کند. شدت امواج تعدیل شده پارامتر بسیار مهمی است که با اندازه‌گیری و تبدیل آن به ساختار مولکولی سیستم، تابع توزیع ذرات اساس نظریه‌های مربوط به ساختار سیال چگال را تشکیل می‌دهند [۱۶ و ۱۵]. شدت پراکندگی کل به شکل ساده زیر نمایش داده می‌شود [۷]:

$$I(\theta) = I_0 \left\{ 1 + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{\sin kr_{ij}}{kr_{ij}} \right\} ; \quad k = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda} \quad (۵۶-۲)$$

که  $\lambda$  طول موج و  $\theta$  زاویه شکست و  $k$  بردار موج است. جمله دوم در طرف راست معادله بالا، نشان دهنده افت و خیز حول شدت پراکندگی زمینه  $I_0$ ، است و به عوامل دستگامی، طبیعت ذرات و غیره بستگی دارد. عبارت،  $\frac{\sin kr_{ij}}{kr_{ij}}$ ، تداخل موج حاصل از هر مرکز پراکندگی  $i$  و  $j$  با فاصله  $r_{ij}$  را

توصیف می‌کند. واضح است که چون شدت موج پراکنده شده به همه مقادیر  $r_{ij}$  بستگی دارد، بنابراین با توزیع جفت مولکول‌ها در ناحیه پراکندگی متناسب است [۷]. بنابراین اگر چگالی احتمال یافتن دو مولکول در  $r_i$  و  $r_j$  با  $\rho^2 g(r)$  نشان داده شود، بسط معادله‌ی (۵۶-۲) ممکن است با یک عبارت انتگرالی جایگزین شود یعنی:

$$\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{\sin kr_{ij}}{kr_{ij}} \equiv 4\pi\rho \int_0^R [g(r) - 1] \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr \quad (57-2)$$

که حد بالای انتگرال،  $R$ ، بزرگتر از ابعاد اتم‌ها یا مولکول‌های سیستم است. در نهایت، با جایگذاری معادله‌ی (۵۷-۲) در معادله‌ی (۵۶-۲) عبارت زیر حاصل می‌گردد:

$$I(\theta) = I_0 \left\{ 1 + 4\pi\rho \int_0^R [g(r) - 1] \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr \right\} \quad (58-2)$$

هنگامی که حد بالای انتگرال به بی‌نهایت میل می‌کند،  $R \rightarrow \infty$ ، افت وخیز در شدت پراکندگی یا تبدیل فوریه به  $h(r) = g(r) - 1$  مربوط می‌شود:

$$I(\theta) \propto 4\pi \int_0^\infty h(r) \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr = h(k) \quad (59-2)$$

که  $h(k)$  تبدیل فوریه تابع  $h(r)$  است. طبق تعریف، فاکتور ساختار،  $S(k)$ ، پارامتری است که از طریق معادله‌ی زیر با تبدیل فوریه تابع همبستگی کل،  $h(k)$ ، مربوط است [۷]:

$$\begin{aligned} S(k) &= 1 + 4\pi\rho \int_0^\infty [g(r) - 1] \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr \\ &= 1 + 4\pi\rho \int_0^\infty h(r) \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr \\ &= 1 + \rho h(k) \end{aligned} \quad (60-2)$$



در این معادله، بین تابع توزیع شعاعی،  $g(r)$ ، و فاکتور ساختار،  $S(k)$ ، ارتباط برقرار شده است. رابطه دیگری نیز برای محاسبه فاکتور ساختار وجود دارد که در آن می‌توان با داشتن تابع همبستگی مستقیم،  $c(r)$ ، رفتار فاکتور ساختار را بررسی کرد. این معادله از این قرار است:

$$S(k) = \frac{1}{(1 - \rho c(k))} \quad (61-2)$$

که  $c(k)$  و  $\rho$  به ترتیب تبدیل فوریه تابع همبستگی مستقیم و چگالی هستند که با این رابطه داده می‌شود [۷۷ و ۷۸]:

$$c(k) = 4\pi \int c(r) \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr \quad (62-2)$$

بنابراین در  $k = 0$  عبارت زیر به دست می‌آید:

$$c(0) = 4\pi \int c(r) r^2 dr \quad (63-2)$$

و با استفاده از معادله‌ی (۶۱-۲) در  $k = 0$  رابطه زیر حاصل می‌شود:

$$S(0) = \frac{1}{1 - \rho c(0)} \quad (64-2)$$

که با جایگذاری معادلات (۶۳-۲) و (۶۴-۲) در معادله‌ی زیر

$$B_r = \frac{1}{K_B T \rho} \frac{1}{\kappa_T} = 1 - 4\pi \rho \int_0^\infty c(r) r^2 dr \quad (65-2)$$

در نهایت معادله‌ی (۶۶-۲) به دست می‌آید:

$$S(0) = K_B T \rho \kappa_T \quad (66-2)$$

ویژگی مهم این معادله در این است که نشان می‌دهد  $S(k)$  در  $k = 0$  فقط دارای یک مفهوم ریاضی محض نیست بلکه برابر یک خاصیت ترمودینامیکی در سیستم است. با افزایش چگالی سیال، تراکم‌پذیری سیال کاهش می‌یابد، در حد چگالی‌های بالا،  $S(0)$  به سمت صفر میل می‌کند [۷۹ و ۸۰].

همانطور که ذکر شد می‌توان با داشتن تابع توزیع شعاعی رفتار فاکتور ساختار را بررسی کرد. از آنجا که عبارت تحلیلی برای تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت در مراجع مختلفی وجود دارد، ما با استفاده از این عبارت رفتار فاکتور ساختار سیالات ساده نظیر زنون و آرگون را محاسبه کرده‌ایم که جزئیات کار در فصل سوم بیان خواهد شد و نتایج حاصل با نتایج مربوط به مدل‌های دیگر مقایسه خواهد گردید.

### ۳-۱- ارائه عبارت تحلیلی برای تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت و ترسیم

آن

همانطور که در فصل‌های گذشته بیان شد، به دست آوردن عبارت تحلیلی برای تابع توزیع شعاعی سیالات واقعی بسیار پیچیده است. اما این کار توسط تعداد زیادی از محققین برای سیال کرات سخت انجام شده و عبارت تحلیلی برای تابع توزیع شعاعی این سیالات ارائه شده است.

جهت به دست آوردن عبارت تحلیلی برای تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت ما از عبارت داده شده توسط اسمیت و هندرسون<sup>۱</sup> [۸۱] آغاز می‌کنیم که فرمول زیر را برای کرات با قطر مولکولی  $\sigma$  ارائه کردند [۸۱]:

$$g(x) = \sum_{n=1}^{\infty} H(x-n) g_n(x) \quad (1-3)$$

در این فرمول  $g(x)$  تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت،  $x = \frac{r}{\sigma}$  فاصله کاهش یافته و  $H(x-n)$  تابع Heaviside می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$H(x-n) = \begin{cases} 0, & \text{for } x < n, \\ 1, & \text{for } x \geq n, \end{cases} \quad (2-3)$$

و توابع  $g_n(x)$  اجزای پیوسته تابع توزیع شعاعی هستند که با این رابطه بیان می‌شوند:

$$x g_n(x) = \frac{(-12\eta)^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{i=0}^2 \lim_{t \rightarrow t_i} \frac{d^{n-1}}{dt^{n-1}} [(t-t_i)^n t \left( \frac{L(t)}{S(t)} \right)^n \exp[t(x-n)]] \quad (3-3)$$

که  $\eta = \frac{\pi}{6} \rho \sigma^3$  و توابع  $S(t), L(t)$  به صورت زیر تعریف می‌شوند [۸۱]:

$$L(t) = \left( 1 + \frac{1}{2} \eta \right) t + (1 + 2\eta) \quad (4-3)$$

و

$$S(t) = (1-\eta)^2 t^3 + 6\eta(1-\eta)t^2 + 18\eta^2 t - 12\eta(1+2\eta) \quad (5-3)$$

<sup>۱</sup>-Smith and Henderson

و سه ریشه تابع چند جمله‌ای مکعبی،  $S(t)$ ، برای  $i = 0, 1, 2$  از فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$t_i = \frac{[-2\eta + (2\eta f)^{1/3}(y_+ j^i + y_- j^{-i})]}{(1-\eta)}, \quad i = 0, 1, 2 \quad (6-3)$$

که توابع  $f, y_{\pm}, j$  عبارتند از:

$$f = 3 + 3\eta - \eta^2$$

$$y_{\pm} = \left[ 1 \pm \left( 1 + 2 \left( \frac{\eta^2}{f} \right)^2 \right)^{1/2} \right]^{1/3}$$

$$j = \exp\left(\frac{2\pi(\sqrt{-i})}{3}\right)$$

با استفاده از تعاریف  $t_i$  در معادله‌ی (۶-۳) تابع مکعبی  $S(t)$  به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{S(t)}{(1-\eta)^2} = (t-t_0)(t-t_1)(t-t_2) \quad (7-3)$$

با قرار دادن معادله‌ی (۷-۳) در معادله‌ی (۳-۳) می‌توان این ساده‌سازی‌ها را انجام داد. ضریب  $(t-t_i)$  در صورت کسر با متناظر آن در مخرج کسر ساده شده و عمل حد گیری شامل جایگزین کردن  $t$  با  $t_i$  در جملات باقی مانده معادله‌ی (۳-۳) خواهد شد. نتیجه این ساده‌سازی‌ها به صورت زیر است:

$$xg_n(x) = \frac{(-12\eta)^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{i=0}^2 \frac{1}{(1-\eta)^{2n}} \frac{d^{n-1}}{dt_i^{n-1}} \left( \frac{t_i L(t_i)^n \exp\{(t_i(x-n))\}}{(t_i-t_{i'})^n (t_i-t_{i''})^n} \right) \quad (8-3)$$

که علامت (') و (") دو ریشه غیر از ریشه  $i$  تابع  $S(t)$  را نشان می‌دهد. برای بررسی  $g_n$  به دست آوردن مشتقات مراتب بالاتر در معادله‌ی (۸-۳) مورد نیاز است. روش این محاسبه به تفصیل در مرجع [۸۲] بیان شده و ما در اینجا از تکرار آن اجتناب می‌کنیم.

در نهایت با استفاده از معادلات (۱-۳) الی (۸-۳) و علی‌رغم طولانی بودن حجم محاسبات می‌توان تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت را محاسبه نمود. ما در این تحقیق، تابع  $g(x)$  را تا ۴ برابر

قطر مولکولی ( $x = \frac{r}{\sigma} = 4$ ) محاسبه نمودیم. علت این که ما تا ۴ برابر قطر مولکولی محاسبات را انجام داده‌ایم این است که اگر بخواهیم برای فواصل مولکولی بالاتر محاسبات را ادامه دهیم نیاز است تا مشتقات مراتب بالاتر را در معادله‌ی (۳-۸) حل کنیم که این امر بر پیچیدگی و طولانی شدن محاسبات می‌افزاید. از طرف دیگر می‌دانیم که نخستین پیک در تابع توزیع شعاعی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است تا آنجا که در مراجع متعددی تنها به بررسی و ترسیم نخستین پیک تابع توزیع شعاعی اکتفا شده است. همچنین مشخص شده است که تنها نخستین لایه تابع توزیع شعاعی در محاسبه خواص تعادلی مواد مفید و ضروری است [۱۸]. بنابراین جهت افزایش دقت نتایج، محاسبه  $g(x)$  را تا ۴ برابر قطر مولکولی انجام داده‌ایم و به علت پیچیده شدن محاسبات و همچنین عدم تغییر قابل ملاحظه به این فاصله بسنده می‌کنیم. در صورت نیاز می‌توان با این روش تا ۲۰ برابر قطر مولکولی نیز تابع  $g(x)$  را محاسبه و نتایج دقیق‌تری حاصل نمود.

نتایج مربوط به توابع توزیع شعاعی چگالی‌های کاهش یافته ۰/۴، ۰/۵، ۰/۶، ۰/۷، ۰/۸ و ۰/۹ در

جداول (۳-۱) و (۳-۲) ارائه شده‌اند.

جدول (۱-۳) - داده‌های مربوط به تابع توزیع شعاعی چندین چگالی کاهش یافته.

$x = \frac{r}{\sigma}$	$g(x)$ $\rho\sigma^3 = 0/4$	$g(x)$ $\rho\sigma^3 = 0/5$	$g(x)$ $\rho\sigma^3 = 0/6$
۱/۰.۱	۱/۷۶۰	۲/۰.۶۶	۲/۴۵۰
۱/۲۰	۱/۳۷۲	۱/۴۶۰	۱/۵۳۴
۱/۴۰	۱/۱۱۲	۱/۰.۹۱	۱/۰.۳۶
۱/۶۰	۰/۹۷۰	۰/۹۲۰	۰/۸۴۹
۱/۸۰	۰/۹۳۰	۰/۸۹۰	۰/۸۶۸
۲/۰۰	۰/۹۵۷	۰/۹۹۱	۱/۰.۴۴
۲/۲۰	۱/۰۰۸	۱/۰.۴۳	۱/۰.۸۹
۲/۴۰	۰/۹۸۸	۱/۰.۶۶	۱/۰.۳۳
۲/۶۰	۰/۹۵۷	۰/۹۵۰	۰/۹۲۰
۲/۸۰	۰/۹۲۷	۰/۹۲۰	۰/۸۹۹
۳/۰۰	۰/۹۲۲	۰/۹۴۷	۰/۹۷۳
۳/۲۰	۰/۹۲۹	۰/۹۵۶	۰/۹۷۴
۳/۴۰	۰/۹۲۳	۰/۹۴۲	۰/۹۴۰
۳/۶۰	۰/۹۱۰	۰/۹۲۰	۰/۹۰۵
۳/۸۰	۰/۸۹۶	۰/۹۰۴	۰/۸۸۷

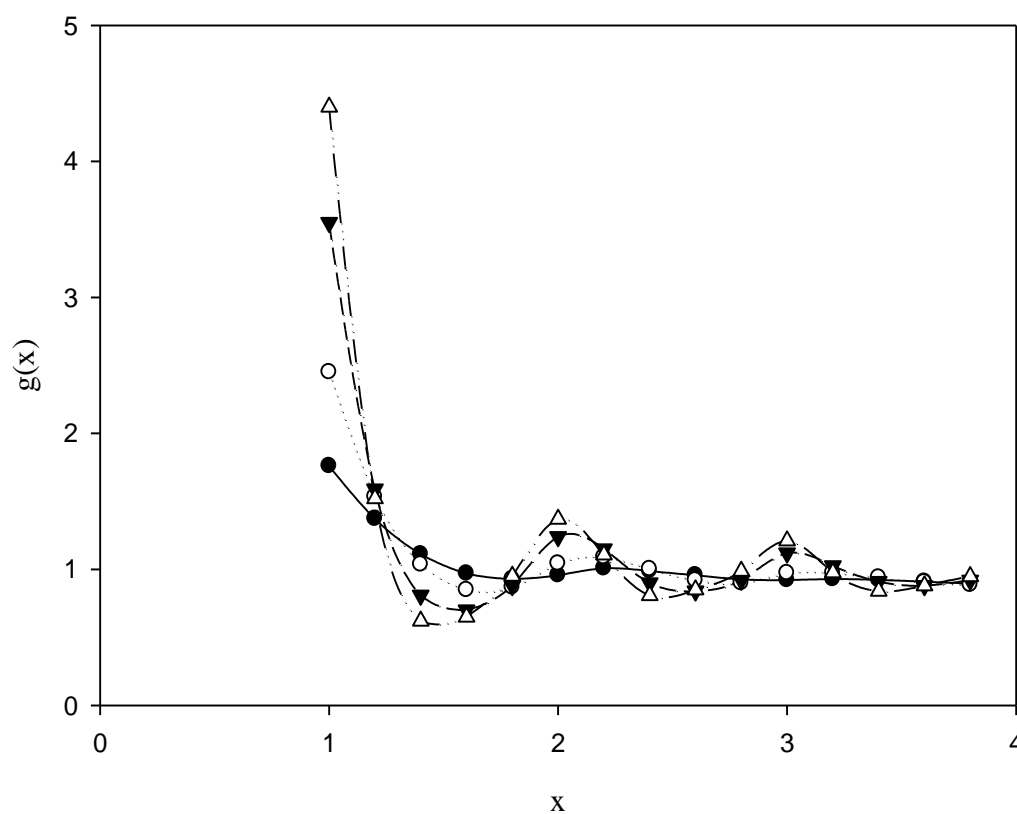
جدول (۳-۲) - داده‌های مربوط به تابع توزیع شعاعی چندین چگالی کاهش یافته.

$x = \frac{r}{\sigma}$	$g(x)$ $\rho\sigma^3 = 0.7$	$g(x)$ $\rho\sigma^3 = 0.8$	$g(x)$ $\rho\sigma^3 = 0.9$
۱/۰.۱	۲/۹۳۰.	۳/۵۵۰.	۴/۴۱۵
۱/۲۰.	۱/۵۸۰.	۱/۵۹۰.	۱/۵۲۰.
۱/۴۰.	۰/۹۴۰.	۰/۸۰۹	۰/۶۲۰.
۱/۶۰.	۰/۷۷۰.	۰/۷۰۰.	۰/۶۵۰.
۱/۸۰.	۰/۸۶۰.	۰/۸۸۰.	۰/۹۵۰.
۲/۰۰.	۱/۲۸۰.	۱/۲۴۰.	۱/۳۷۰.
۲/۲۰.	۱/۱۱۳	۱/۱۵۰.	۱/۱۰۷
۲/۴۰.	۰/۹۷۸	۰/۹۰۰.	۰/۸۰۸
۲/۶۰.	۰/۸۹۰.	۰/۸۴۰.	۰/۸۵۰.
۲/۸۰.	۰/۸۹۰.	۰/۹۲۰.	۰/۹۸۷
۳/۰۰.	۱/۰.۲۸	۱/۱۲۰.	۱/۲۱۰.
۳/۲۰.	۱/۰.۰۲	۱/۰.۲۵	۰/۹۷۶
۳/۴۰.	۰/۹۳۳	۰/۹۱۰.	۰/۸۴۰.
۳/۶۰.	۰/۸۹۰.	۰/۸۸۰.	۰/۸۸۰.

۳/۸۰	۰/۸۸۷	۰/۹۲۰	۰/۹۴۸
------	-------	-------	-------

در شکل (۱-۳) نمودار مربوط به تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت در چند چگالی کاهش

یافته ترسیم شده است.

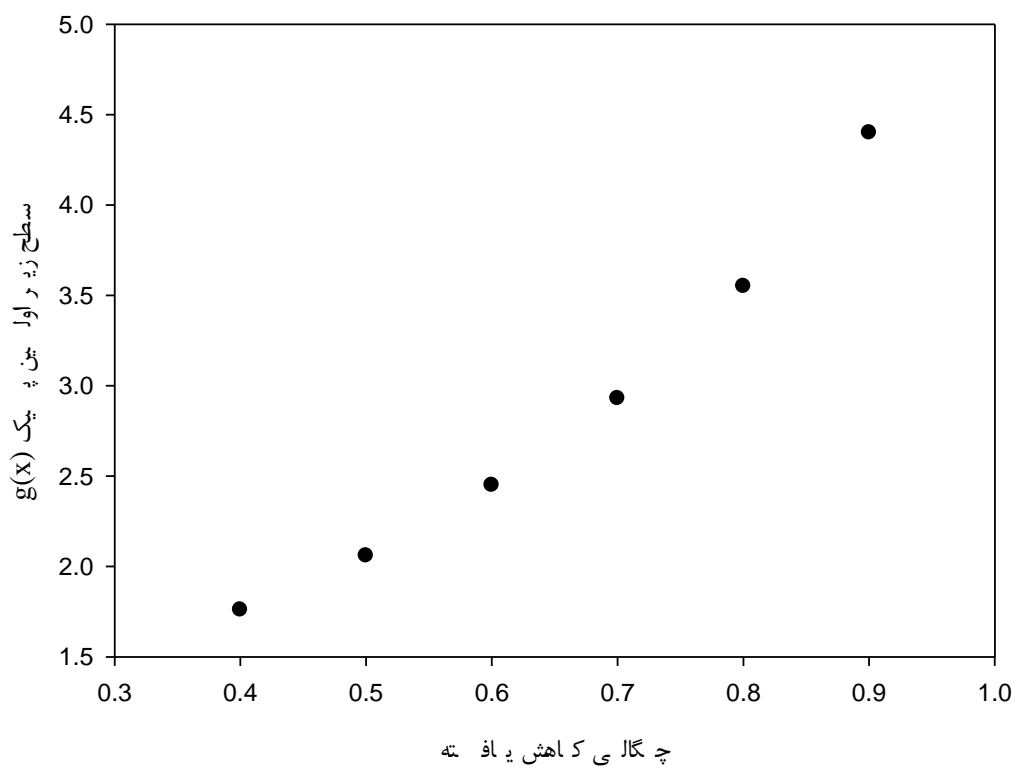


شکل (۱-۳) - تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت،  $g(x)$ ، بر حسب فاصله کاهش یافته  $x$ ، در چگالی کاهش

یافته ۰/۴ (—●—)، ۰/۶ (⋯○⋯⋯)، ۰/۸ (—▼—) و ۰/۹ (—△—) .



با توجه به داده‌های جداول (۱-۳) و (۲-۳) و نیز با مشاهده شکل (۱-۳) ملاحظه می‌گردد با افزایش چگالی، سطح زیر اولین پیک  $g(x)$  نیز افزایش خواهد یافت. برای مشاهده بهتر روند این تغییرات، نمودار سطح زیر اولین پیک تابع توزیع شعاعی در برابر چگالی در شکل (۲-۳) ترسیم شده است.



شکل (۲-۳) - نمودار تغییر سطح زیر اولین پیک تابع توزیع شعاعی در برابر چگالی یافته.

۲-۳- استفاده از عبارت تحلیلی بیان شده برای به دست آوردن تابع توزیع

شعاعی سیال زنون در چگالی‌های مختلف

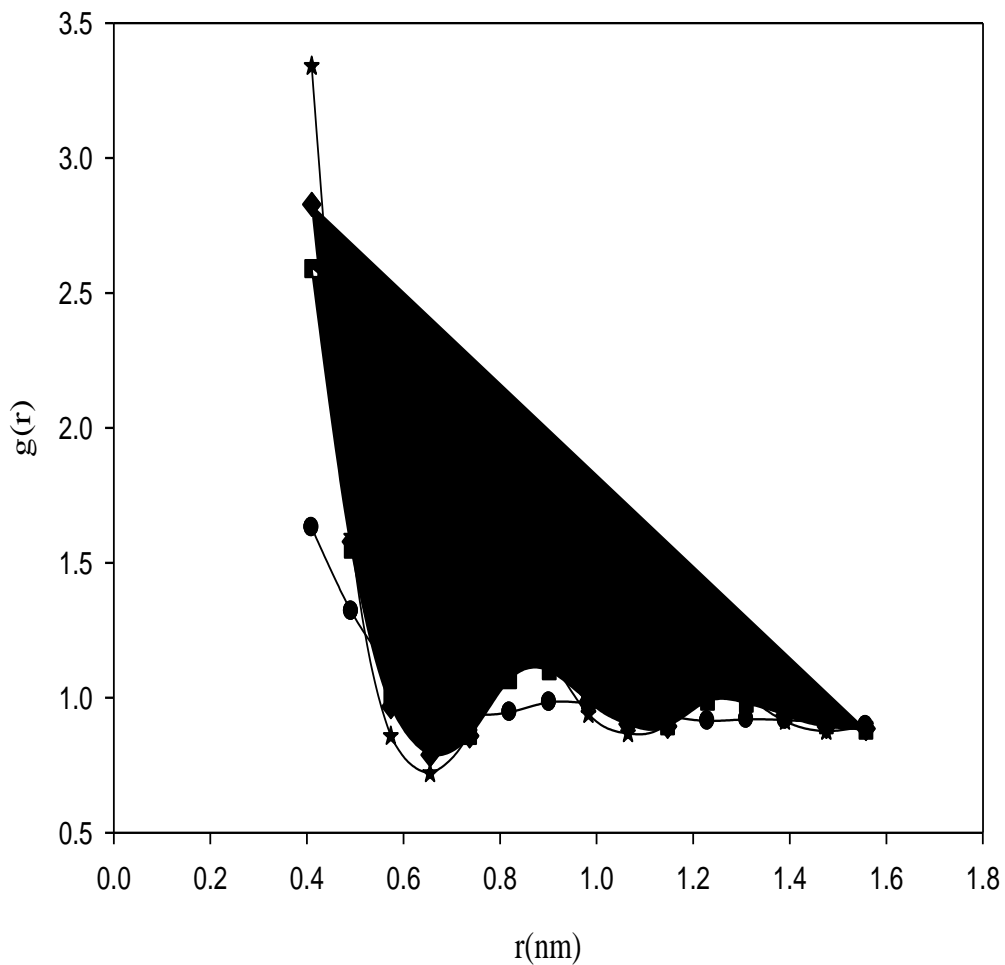
ما در این تحقیق با به کارگیری مدل کرات سخت برای سیال زنون، توابع توزیع شعاعی را در نواحی ترمودینامیکی که این تقریب از اعتبار بالایی برخوردار است محاسبه نمودیم که نتایج آن در جدول (۳-۳) ارائه شده است.

جدول (۳-۳) - تابع توزیع شعاعی سیال زنون با مدل سیال کرات سخت در چگالی‌های مختلف.

$r(nm)$	$g(r)$ $\rho = ۸/۳۸$ (mol/L)	$g(r)$ $\rho = ۱۵/۲۱$ (mol/L)	$g(r)$ $\rho = ۱۶/۳۵$ (mol/L)	$g(r)$ $\rho = ۱۸/۴۶$ (mol/L)
۰/۴۰۹۹	۱/۶۳۰	۲/۵۹۰	۲/۸۲۸	۳/۳۴۰
۰/۴۹۱۹	۱/۳۲۰	۱/۵۵۰	۱/۵۷۸	۱/۵۹۶
۰/۵۷۳۹	۱/۱۱۰	۱/۰۱۲	۰/۹۶۷	۰/۸۵۸
۰/۶۵۵۰	۰/۹۹۰	۰/۸۲۶	۰/۷۸۸	۰/۷۲۰
۰/۷۳۷۰	۰/۹۴۰	۰/۸۶۰	۰/۸۵۹	۰/۸۷۰
۰/۸۱۹۸	۰/۹۴۶	۱/۰۶۷	۱/۱۰۷	۱/۱۹۹
۰/۹۰۱۸	۰/۹۸۳	۱/۱۰۰	۱/۱۲۵	۱/۱۴۹
۰/۹۸۳۰	۰/۹۷۸	۰/۹۹۰	۰/۹۸۶	۰/۹۳۹
۱/۰۶۵۰	۰/۹۵۷	۰/۹۲۰	۰/۹۰۲	۰/۸۶۸
۱/۱۴۷۰	۰/۹۳۲	۰/۸۹۶	۰/۸۹۴	۰/۹۰۶
۱/۲۲۹۷	۰/۹۱۴	۰/۹۸۷	۱/۰۱۳	۱/۰۷۹
۱/۳۱۰۰	۰/۹۲۰	۰/۹۸۰	۰/۹۹۶	۱/۰۱۲

۱/۳۹۰۰	۰/۹۱۷	۰/۹۴۰	۰/۹۳۶	۰/۹۱۳
۱/۴۷۵۶	۰/۹۰۸	۰/۹۰۰	۰/۸۹۳	۰/۸۷۶
۱/۵۵۷۶	۰/۸۹۶	۰/۸۸۰	۰/۸۸۶	۰/۸۹۴

با توجه به داده‌های جدول (۳-۳)، تابع توزیع شعاعی سیال زنون را در شکل (۳-۳) برای چگالی - های مختلف رسم نموده و روند تغییرات آن را نسبت به چگالی مشاهده می‌نماییم. همان طور که قبلاً ذکر شد با افزایش چگالی سطح زیر اولین پیک تابع توزیع شعاعی یا عدد کئوردیناسیون سیال افزایش می‌یابد. با افزایش چگالی مولکول‌ها به یکدیگر نزدیک تر شده لذا تعداد آنها در اطراف اتم مرکزی افزایش می‌یابد.



شکل (۳-۳) - نمودار تابع توزیع شعاعی سیال زنون در چگالی‌های ۱۸/۳۸ mol/L (●-), ۱۵/۲۱ mol/L (■-), ۱۶/۳۵ mol/L (◆-), و ۱۸/۴۶ mol/L (★-).

### ۳-۳- بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با استفاده از مدل سیال کرات

#### سخت در چگالی‌های مختلف

پس از بررسی رفتار تابع توزیع شعاعی سیال زنون، می‌توان فاکتور ساختار سیال زنون را به وسیله

تابع توزیع شعاعی ارزیابی نمود. رابطه‌ای که برای این منظور استفاده شده به قرار زیر است:

$$S(k) = 1 + 4\pi\rho \int_0^{\infty} (g(r) - 1) \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr \quad (9-3)$$

با قرار دادن عبارت تحلیلی محاسبه شده برای تابع توزیع شعاعی در این رابطه و نیز با استفاده از نرم افزار مناسب و با حل انتگرال‌های متعدد می‌توان فاکتور ساختار را محاسبه کرد. نکته‌ای که در اینجا حائز اهمیت است حدود انتگرالگیری در معادله‌ی (۳-۹) می‌باشد. همان‌طور که مشاهده می‌کنیم این حدود از صفر تا بی‌نهایت لحاظ شده است. برای اینکه انتگرال قابل حل گردد لازم است حد بالای انتگرال تغییر کند. با توجه به اینکه ما تابع توزیع شعاعی را تا ۴ برابر قطر مولکولی ( $4\sigma$ ) محاسبه کردیم لذا ضروری است حد بالای انتگرال به  $4\sigma$  تغییر کند. با استفاده از این توضیحات به بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی‌های مختلف می‌پردازیم. داده‌های حاصل از این بررسی در جداول (۳-۴) الی (۳-۶) ارائه شده و شکل‌های مربوط به این داده‌ها در ادامه ترسیم شده‌اند.

جدول (۳-۴) - داده‌های  $S(k)$  سیال زنون در چگالی  $۸/۳۸ \text{ mol/L}$ .

$k(\text{nm}^{-1})$	$S(k)$
۴/۰	۰/۸۸۳
۱۰	۰/۶۵۷

۱۵	۱/۲۵۸
۲۰	۰/۹۷۰
۲۵	۰/۹۳۶
۳۰	۱/۰۵۳
۳۵	۱/۰۰۴
۴۰	۰/۹۷۲
۴۵	۱/۰۱۹
۵۰	۱/۰۰۴
۵۵	۰/۹۸۶
۶۰	۱/۰۰۸
۷۰	۰/۹۹۱

جدول (۳-۵) - داده‌های  $S(k)$  سیال زنون در چگالی  $۱۶/۳۵ \text{ mol/L}$ .

$k(\text{nm}^{-1})$	$S(k)$
۴/۰	۰/۹۰۰
۱۰	۰/۲۴۵
۱۵	۱/۸۰۵

۲۰	۰/۹۵۵
۲۵	۰/۸۱۳
۳۰	۱/۱۸۲
۳۵	۱/۰۰۱
۴۰	۰/۹۲۱
۴۵	۱/۰۶۷
۵۰	۱/۰۰۷
۵۵	۰/۹۵۶
۶۰	۱/۰۳۰
۷۰	۰/۹۷۳

$k(nm^{-1})$	$S(k)$
۴۰	۰/۹۲۶
۱۰	۰/۱۴۳
۱۵	۱/۸۲۵

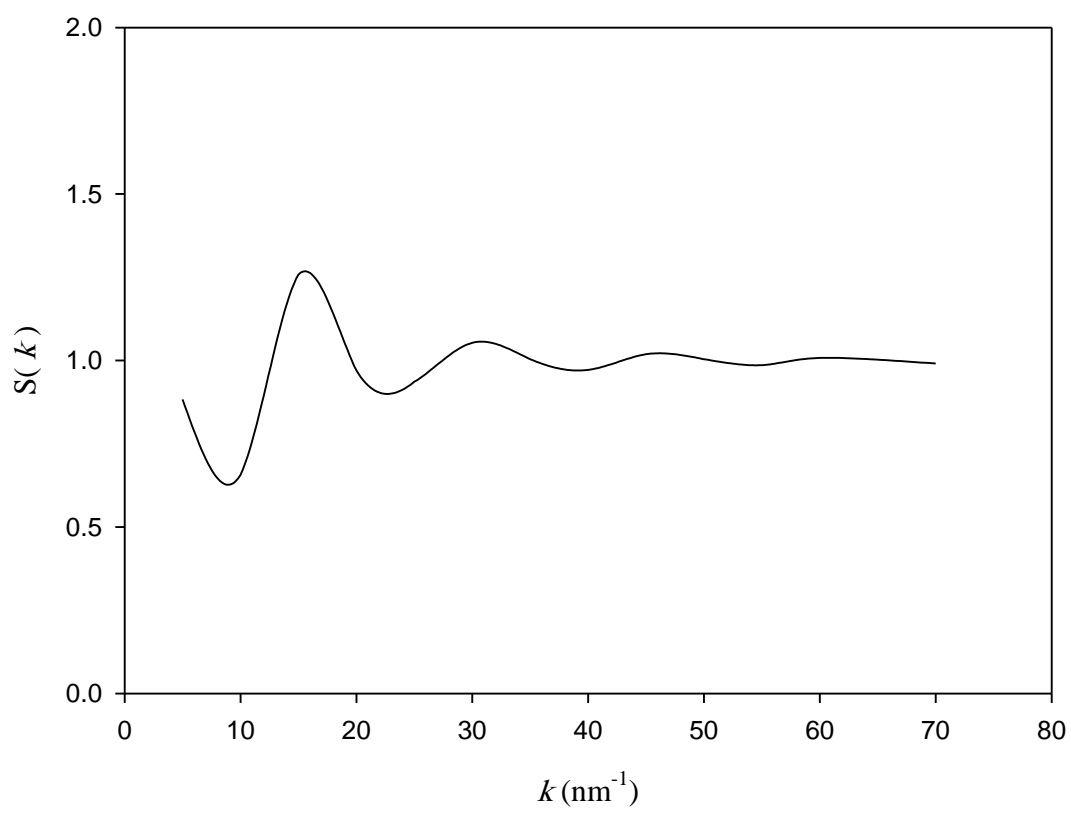
$S(k)$  سیال زنون در

۲۰	۰/۹۴۴
۲۵	۰/۷۶۷
۳۰	۱/۲۳۲
۳۵	۱/۰۰۰
۴۰	۰/۸۹۹
۴۵	۱/۰۸۸
۵۰	۱/۰۰۶
۵۵	۰/۹۴۵
۶۰	۱/۰۴۰
۷۰	۰/۹۶۰

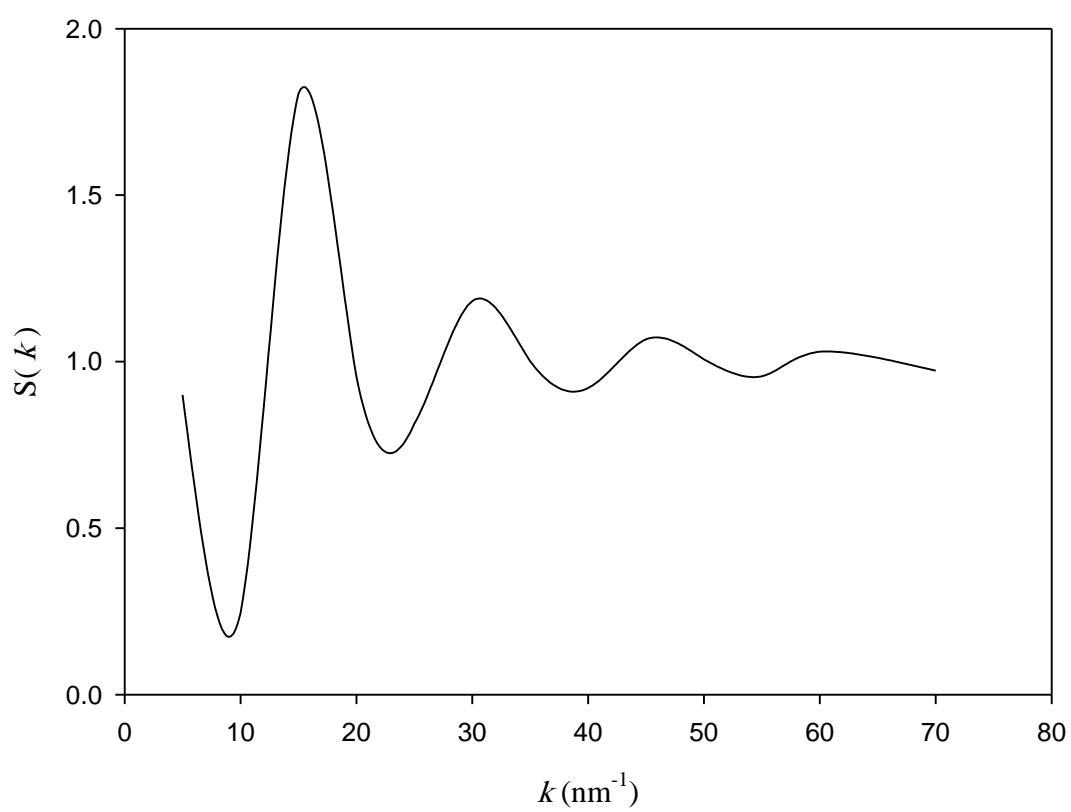
جدول (۳-۶) - داده‌های

چگالی  $mol/L$  ۱۸/۴۶

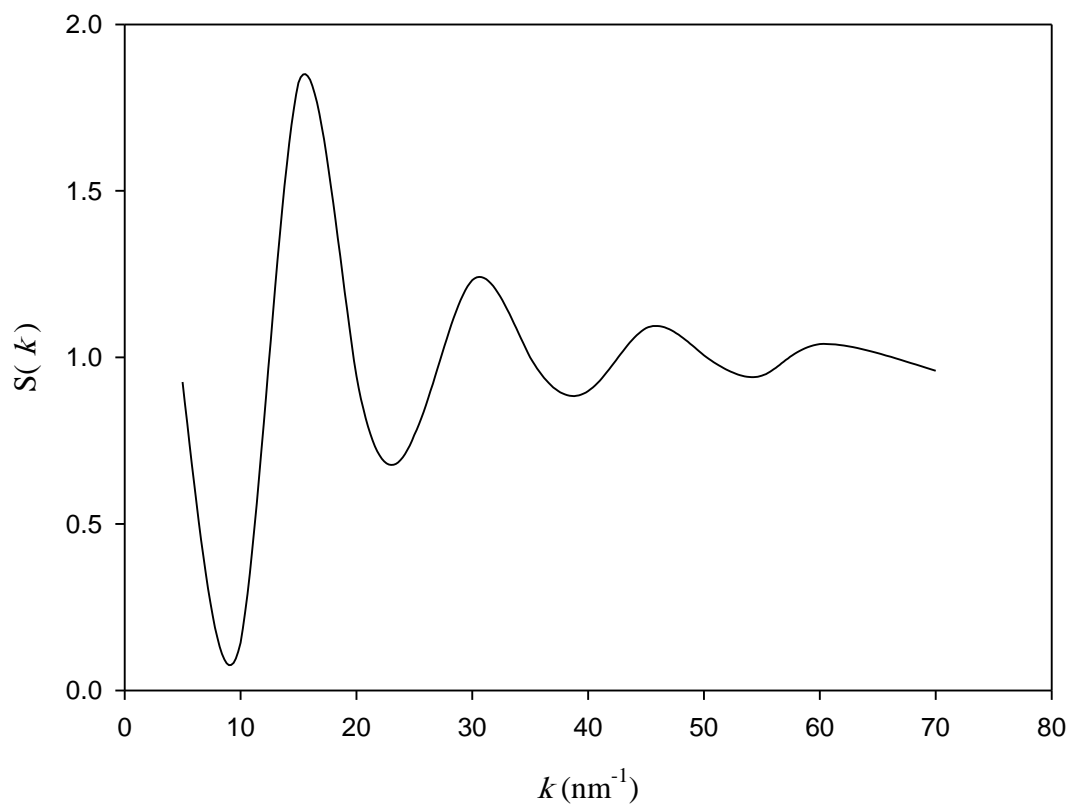




شکل (۳-۴) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = ۸/۳۸ \text{ mol/L}$ .



شکل (۵-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = ۱۶/۳۵ \text{ mol/L}$ .



شکل (۶-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = 18/46 \text{ mol/L}$ .

با توجه به داده‌های جداول (۴-۳) الی (۶-۳) و نیز با مشاهده شکل‌های (۴-۳) الی (۶-۳) ملاحظه می‌گردد که این مدل قادر به پیش‌بینی رفتار فاکتور ساختار در مقادیر  $k$  بسیار کم نمی‌باشد. اما رفتار فاکتور ساختار را در گستره وسیعی از  $k$  به خوبی پیش‌بینی می‌نماید.

### ۳-۴- بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با استفاده از مدل سیال کرات

#### سخت در چگالی‌های مختلف

ما برای بررسی بیشتر مدل، مطالعات خود را بر روی سیال آرگون نیز انجام دادیم و رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون را در گستره وسیعی از  $k$  بررسی کردیم که نتایج حاصل در جداول (۳-۷) الی (۳-۹) آورده شده و شکل‌های مربوطه در ادامه ترسیم شده‌اند.

جدول (۳-۷) - داده‌های  $S(k)$  سیال آرگون در چگالی  $0.1675 \text{ mol/L}$ .

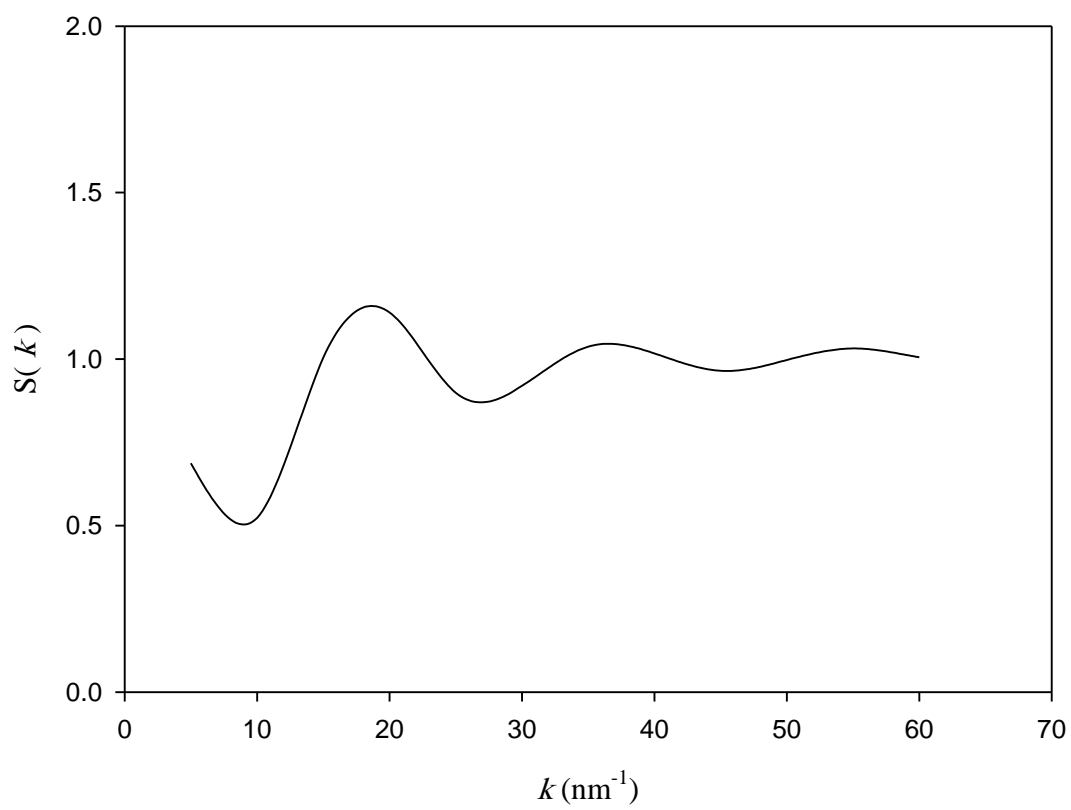
$k(\text{nm}^{-1})$	$S(k)$
۵/۰	۰/۶۸۷
۱۰	۰/۵۲۳
۱۵	۱/۰۰۴
۲۰	۱/۱۴۰
۲۵	۰/۸۹۹
۳۰	۰/۹۲۰
۳۵	۱/۰۳۷
۴۰	۱/۰۱۷
۴۵	۰/۹۶۵
۵۰	۰/۹۹۷
۵۵	۱/۰۳۲
۶۰	۱/۰۰۵

جدول (۳-۸) - داده‌های  $S(k)$  سیال آرگون در چگالی  $24/58 \text{ mol/L}$ .

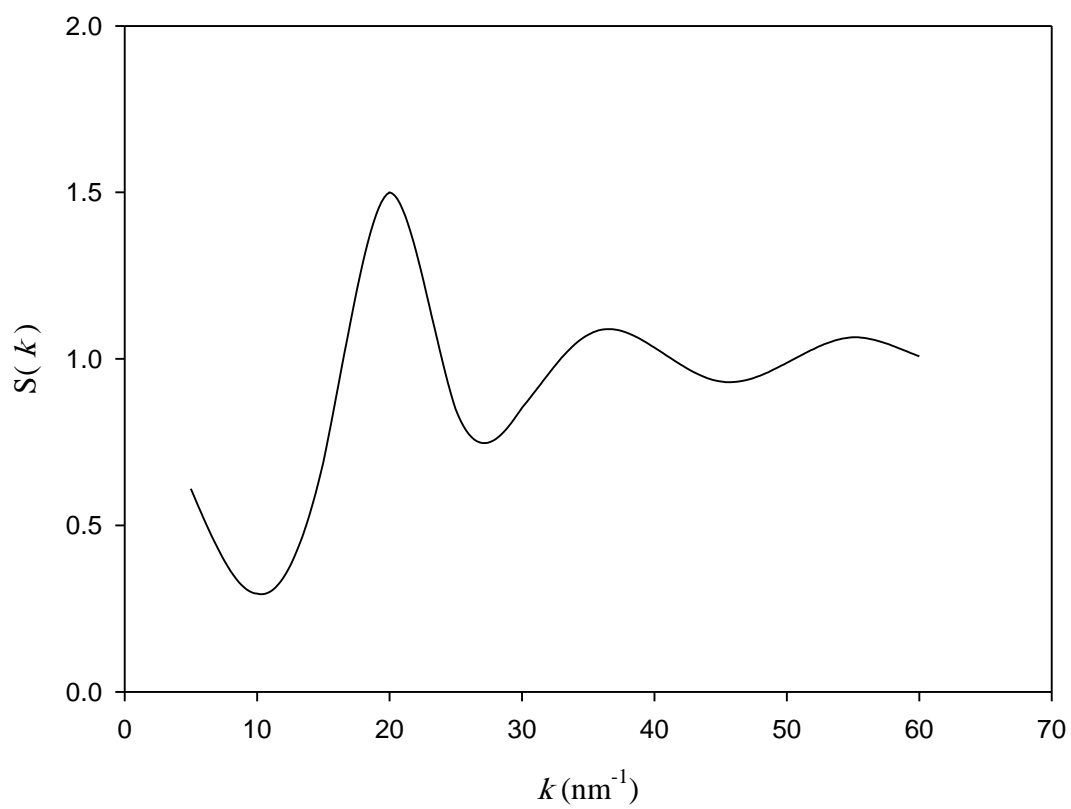
$k(\text{nm}^{-1})$	$S(k)$
۵/۰	۰/۶۱۰
۱۰	۰/۲۹۵
۱۵	۰/۶۸۹
۲۰	۱/۵۰۰
۲۵	۰/۸۴۸
۳۰	۰/۸۵۳
۳۵	۱/۰۷۲
۴۰	۱/۰۳۳
۴۵	۰/۹۳۲
۵۰	۰/۹۸۸
۵۵	۱/۰۶۵
۶۰	۱/۰۰۷

جدول (۳-۹) - داده‌های  $S(k)$  سیال آرگون در چگالی  $33/51 \text{ mol/L}$ .

$k(\text{nm}^{-1})$	$S(k)$
۵/۰	۰/۶۳۷
۱۰	۰/۲۶۵
۱۵	۰/۳۵۴
۲۰	۲/۲۹۰
۲۵	۰/۸۸۵
۳۰	۰/۷۳۰
۳۵	۱/۰۸۰
۴۰	۱/۰۵۹
۴۵	۰/۸۷۶
۵۰	۰/۹۷۹
۵۵	۱/۱۳۹
۶۰	۱/۰۰۲

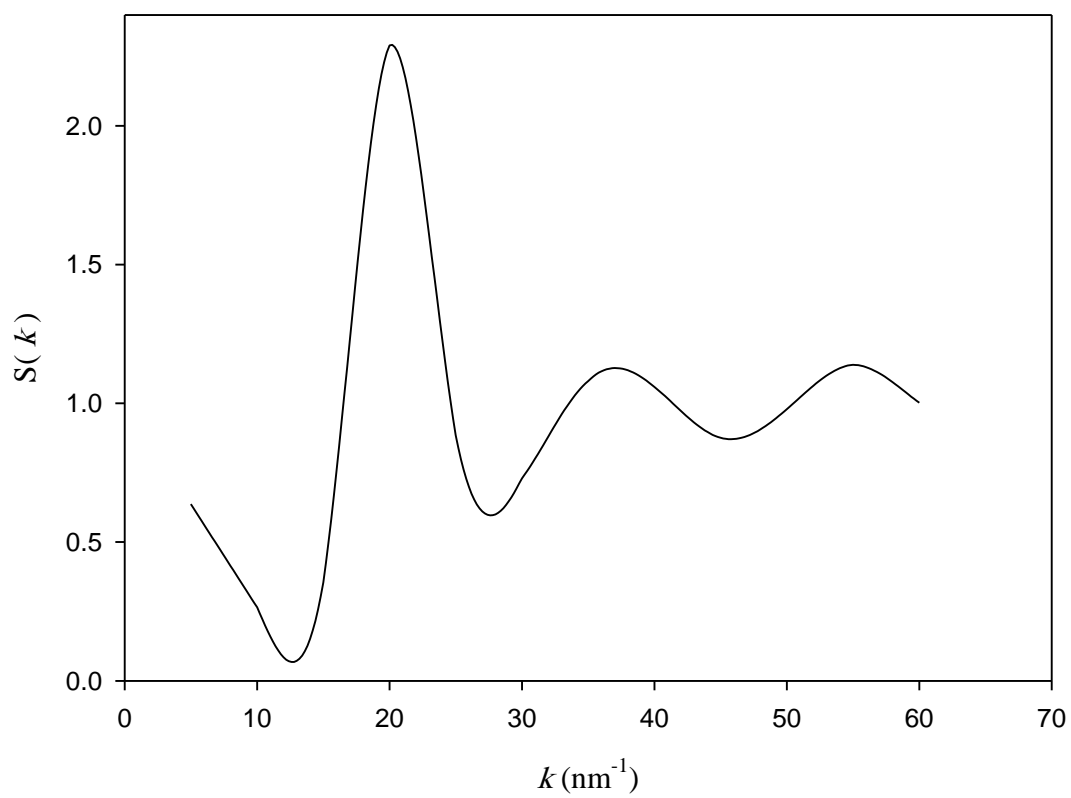


شکل (۷-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = 16/75 \text{ mol/L}$ .



شکل (۸-۳) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = 24/58 \text{ mol/L}$ .

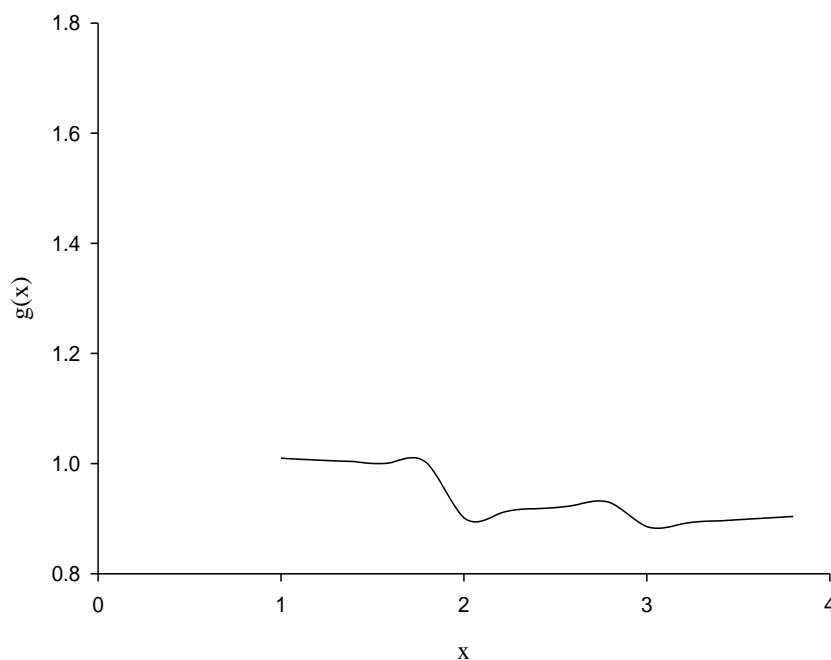




شکل (۳-۹) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با مدل کرات سخت در چگالی  $\rho = 33/51 \text{ mol/L}$ .

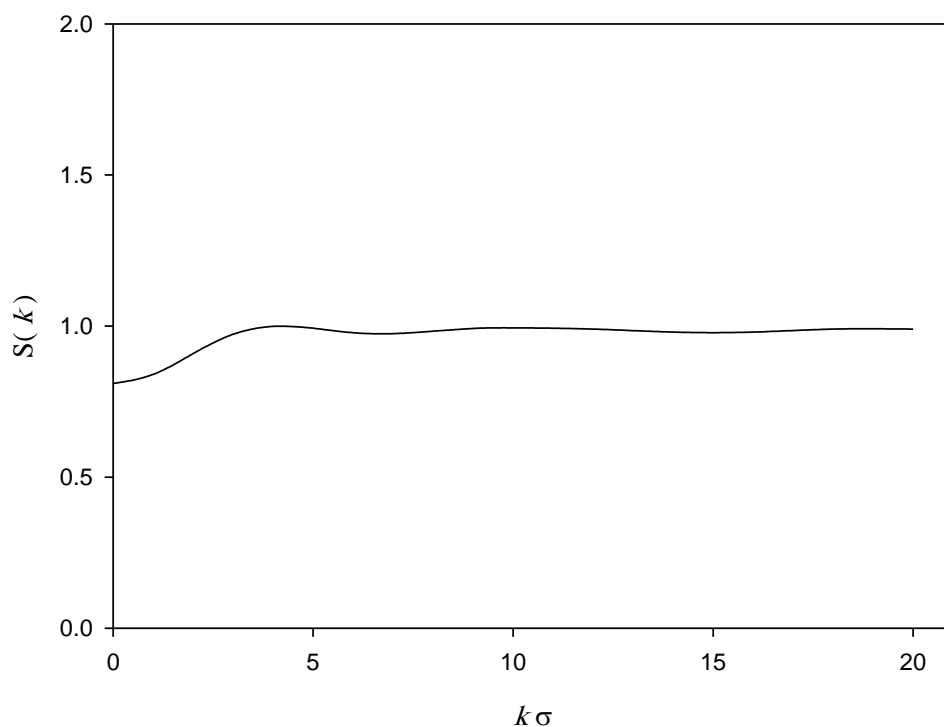
### ۳-۵- بررسی نتایج مدل سیال کرات سخت در چگالی‌های پایین

اگر چگالی سیال بالا نباشد نمی‌توان از مدل سیال کرات سخت برای بررسی رفتار فاکتور ساختار استفاده کرد، زیرا همان طور که قبلاً بیان شد شرایطی لازم است تا سیال را بتوان به صورت سیال کرات سخت تصور کرد و از جمله این شرایط چگالی بالا می‌باشد. برای نشان دادن اینکه این مدل در چگالی‌های پایین کارآمد نیست به بررسی تابع توزیع شعاعی و رفتار فاکتور ساختار در چگالی پایین می‌پردازیم. برای مثال اگر چگالی کاهش یافته  $0.0073$  را در نظر بگیریم تابع توزیع شعاعی برای آن با استفاده از عبارت تحلیلی مربوط به سیال کرات سخت به صورت شکل (۳-۱۰) می‌باشد.



شکل (۳-۱۰)- تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت،  $g(x)$ ، بر حسب فاصله کاهش یافته،  $x$ ، در چگالی کاهش یافته،  $\rho\sigma^3 = 0.0073$ .

و نیز رفتار فاکتور ساختار با استفاده از مدل سیال کرات سخت برای این چگالی کاهش یافته در شکل (۱۱-۳) نشان داده شده است.



شکل (۱۱-۳) رفتار فاکتور ساختار در چگالی کاهش یافته  $\rho\sigma^3 = 0.073$  بر حسب بردار موج کاهش یافته  $k\sigma$ .

در شکل (۱۱-۳) تغییر محسوس در فاکتور ساختار با تغییر در بردار موج کاهش یافته مشاهده نمی‌شود. به خصوص در نواحی  $k\sigma$  بالا که نمودار تقریباً به صورت یک خط راست دیده می‌شود، اما در نمودارهای قبل که به چگالی‌های بالا اختصاص داشت تغییرات در فاکتور ساختار بر حسب بردار موج کاملاً محسوس و آشکار بود. بنابراین از این روش نمی‌توان برای بررسی روند تغییرات تابع توزیع شعاعی بر حسب فاصله و نیز تغییرات فاکتور ساختار بر حسب بردار موج در چگالی‌های پایین بهره گرفت. پس این مدل تنها در ناحیه چگالی بالا و  $k$  بالا روند مناسبی برای فاکتور ساختار پیش‌بینی می‌نماید.

### ۳-۶- بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی‌های پایین

به منظور بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی‌های پایین می‌بایست از مدل‌های دیگری استفاده کنیم که بتوانند رفتار فاکتور ساختار را به درستی پیش‌بینی نمایند. در این مدل‌ها سهم نیروهای جاذبه لحاظ شده است. مدلی که ما در این تحقیق از آن بهره گرفته‌ایم به شرح زیر است.

در این مدل تابع همبستگی مستقیم به دو سهم مرجع و دنباله تقسیم می‌گردد [۸۳]:

$$c(r) = \begin{cases} c_0 (1 - 0.127 \rho^2 \sigma^6) & r \leq \sigma \\ \frac{B}{r} \exp(20(1 - \frac{r}{\sigma})) & r > \sigma \end{cases} \quad (10-3)$$

$c_0$  تابع همبستگی مستقیم سیال کرات سخت است که از رابطه PY به طور تحلیلی قابل حل است و به طور کامل در فصل دوم معرفی شده است (معادلات (۲-۴۵) و (۲-۴۶)).  $\rho$  و  $\sigma$  به ترتیب چگالی و قطر مولکولی را نشان می‌دهند و  $B$  پارامتر تنظیم پذیر می‌باشد. لازم به ذکر است که در این رابطه پارامترهای  $\sigma$  و  $B$  را باید بسته به شرایط ترمودینامیکی مورد نظر بهینه کرد. برای این منظور از رابطه زیر استفاده می‌شود:

$$B_r = \frac{1}{K_B T} \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = 1 - 4\pi \rho \int_0^\infty c(r) r^2 dr \quad (11-3)$$

که  $B_r$  ضریب کشیدگی و  $K_B$  ثابت بولتزمن می‌باشد.

برای بهینه کردن  $\sigma$  به این ترتیب عمل می‌کنیم که در فشار و چگالی بالا که در آن شرایط قسمت مرجع تابع  $c(r)$  سهم اصلی را خواهد داشت از قسمت دنباله آن صرف نظر می‌کنیم. در این صورت رابطه (۱۱-۳) به این صورت نوشته می‌شود:

$$B_r = \frac{1}{K_B T} \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = 1 - 4\pi \rho \int_0^\sigma c_0 \left( \frac{r}{\sigma}, \rho \sigma^3 \right) (1 - 0.127 \rho^2 \sigma^6) r^2 dr \quad (12-3)$$

که برای محاسبه ضریب کشیدگی از داده‌های  $P, V, T$  زنون [۸۴] استفاده می‌کنیم در این صورت تنها مجهول باقی مانده  $\sigma$  خواهد بود.

برای بهینه کردن  $B$  نیز به این طریق عمل می‌کنیم که با صرف نظر کردن از وابستگی چگالی  $\sigma$  قطر مولکولی بهینه شده در چگالی بالا را مورد استفاده قرار داده و با توجه به رابطه:

$$B_r = \frac{1}{K_B T} \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = \quad (۱۳-۳)$$

$$1 - 4\pi\rho \int_0^\sigma c_0 \left( \frac{r}{\sigma}, \rho\sigma^3 \right) (1 - 0.127\rho^2\sigma^6) r^2 dr + \int_\sigma^\infty \frac{B}{r} \exp\left(20\left(1 - \frac{r}{\sigma}\right)\right) r^2 dr$$

تنها مجهول  $B$  خواهد بود. لازم به ذکر است که برای محاسبه ضریب کشیدگی در چگالی مورد نظر از معادله حالت ویریال زنون استفاده شده که این رابطه به تفصیل در مرجع [۸۵] بیان شده است. به این ترتیب در هر شرایط ترمودینامیکی می‌توان  $\sigma$  و  $B$  را بهینه کرده و به این طریق رفتار فاکتور ساختار را بررسی نماییم. در زیر داده‌های مربوط به محاسبات  $S(k)$  سیال زنون در دماهای ۲۶۰ K و ۲۸۵ K و ۳۰۰ K آورده شده است.

جدول (۱۰-۳) - پارامتر بهینه شده  $B$  در چگالی‌های مختلف در دمای ۲۶۰ K و قطر مولکولی  $A^0$  ۳/۱۳.

چگالی (mol/L)	$B$ (nm)
۰/۳۳	۱۰/۵۳۲
۰/۷۶	۱۰/۳۵۰
۲/۲۸	۹/۷۸۰

۳/۰۴	۹/۵۴۰
------	-------

جدول (۳-۱۱) - پارامتر بهینه شده  $B$  در چگالی‌ها مختلف در دمای  $285\text{ K}$  و قطر مولکولی  $A^0$  ۳/۰۳۷.

چگالی (mol/L)	$B$ (nm)
۰/۳۳	۹/۵۳۶
۰/۷۶	۹/۳۶۰
۲/۲۸	۸/۷۲۰
۳/۰۴	۸/۴۴۰

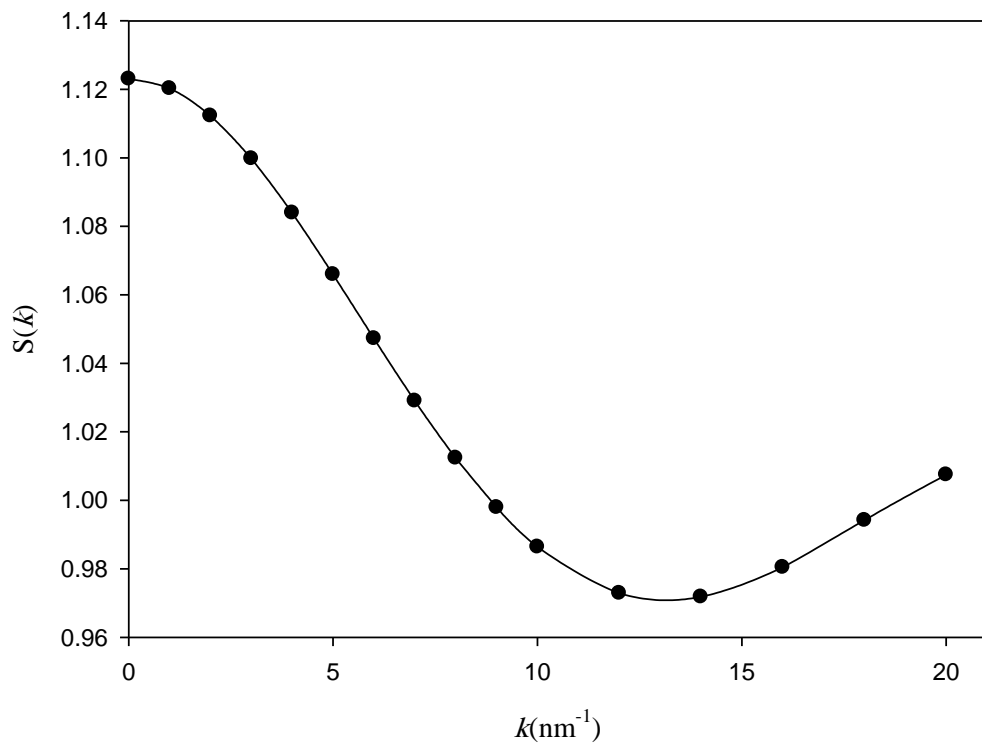
جدول (۳-۱۲) - پارامتر بهینه شده  $B$  در چگالی‌ها مختلف در دمای  $300\text{ K}$  و قطر مولکولی  $A^0$  ۲/۸۸.

چگالی (mol/L)	$B$ (nm)
۰/۳۳	۹/۴۷۰
۰/۷۶	۹/۲۸۰
۲/۲۸	۸/۵۷۰
۳/۰۴	۸/۲۳۰

همانطور که داده‌ها نیز نشان می‌دهند در یک دمای ثابت با افزایش چگالی به علت زیاد شدن

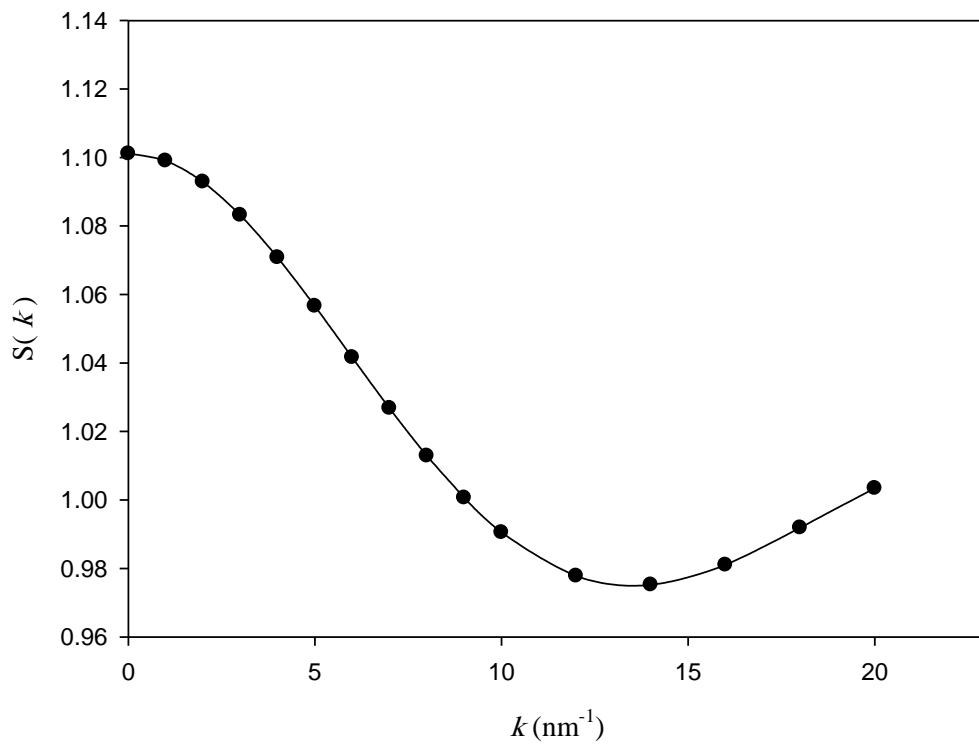
اثرات دافعه مقدار پارامتر  $B$  که به میزان جاذبه وابسته است کاهش می‌یابد. همچنین در یک چگالی

ثابت با افزایش دما به علت افزایش دافعه در مقادیر  $B$  کاهش مشاهده می‌شود.

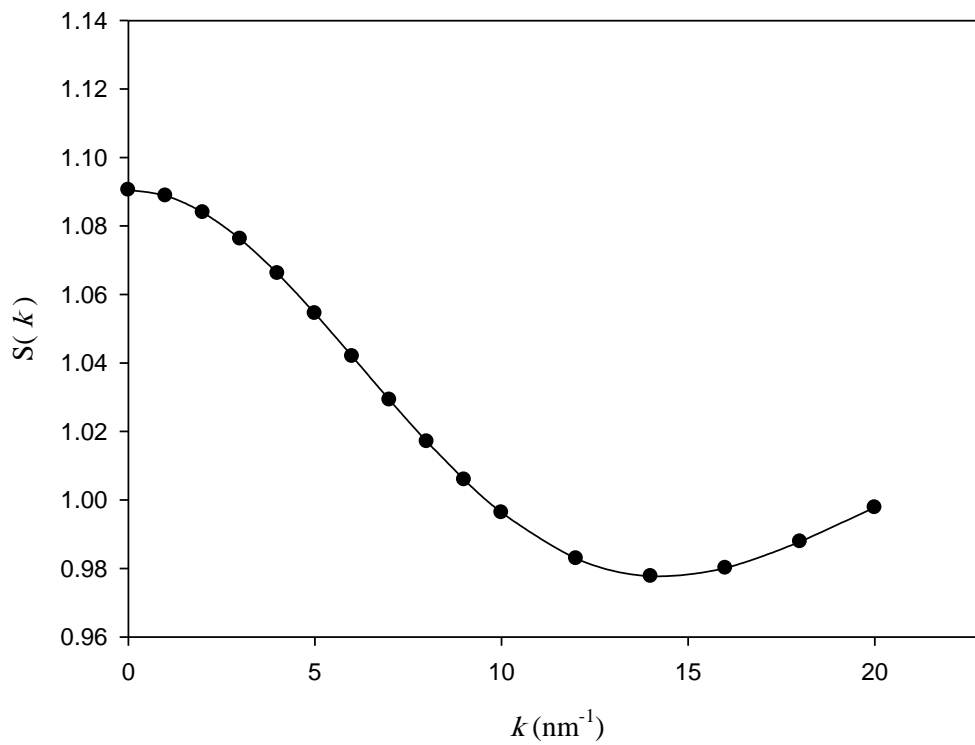


شکل (۳-۱۲)- رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $260 \text{ K}$  و چگالی  $0.33 \text{ mol/L}$ .

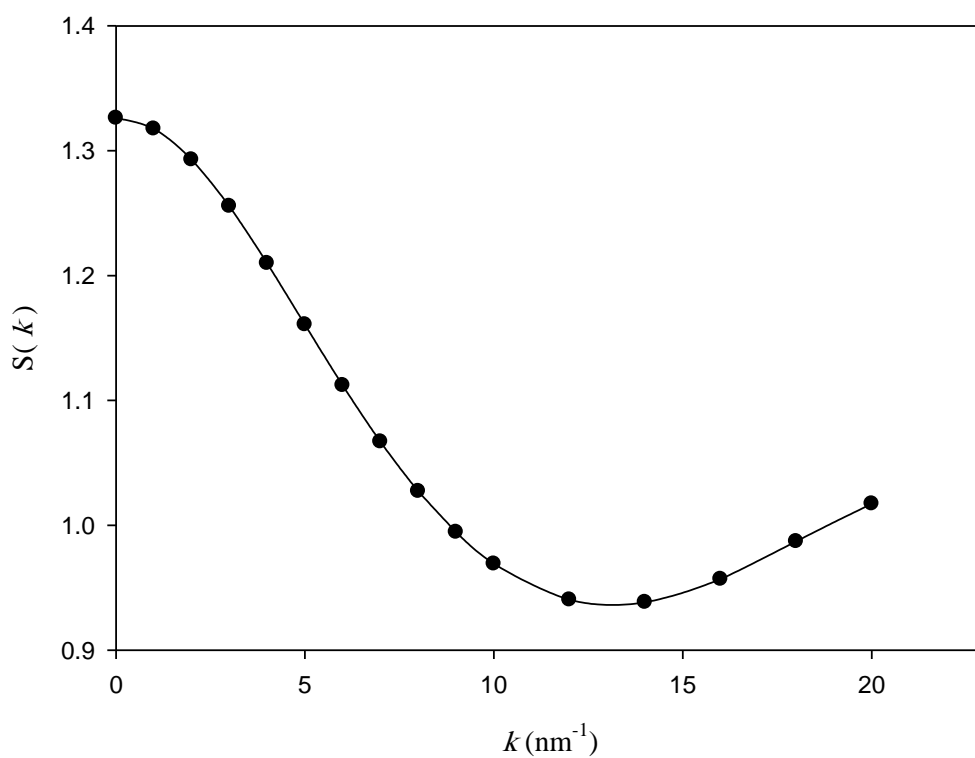




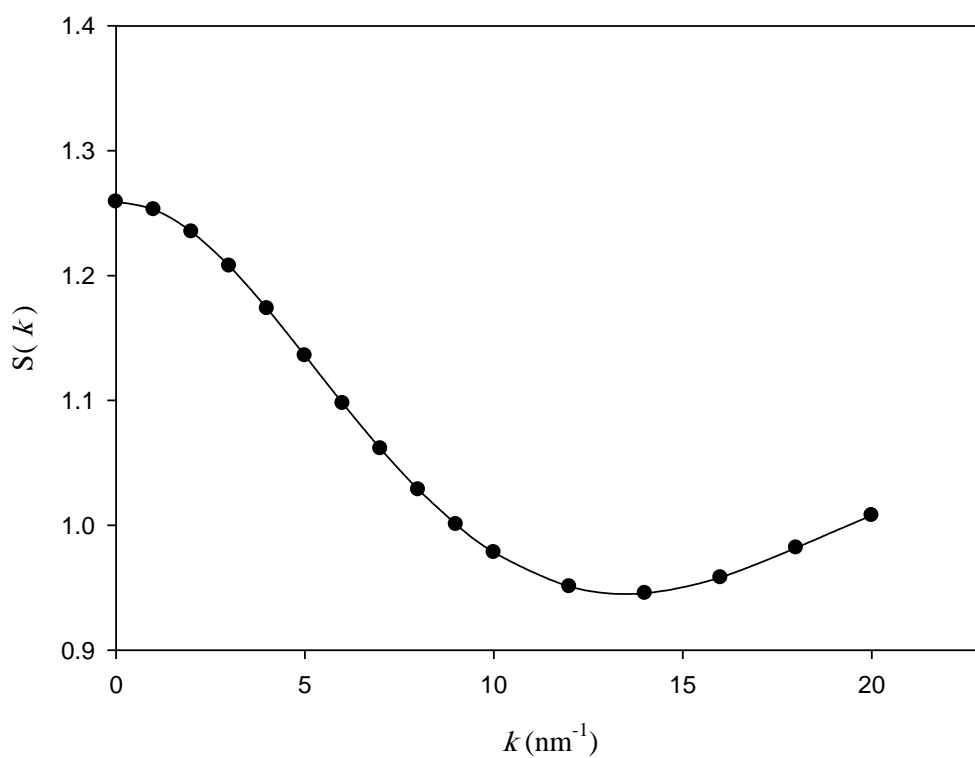
شکل (۳-۱۳)- رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای ۲۸۵ K و چگالی ۰/۳۳ mol/L.



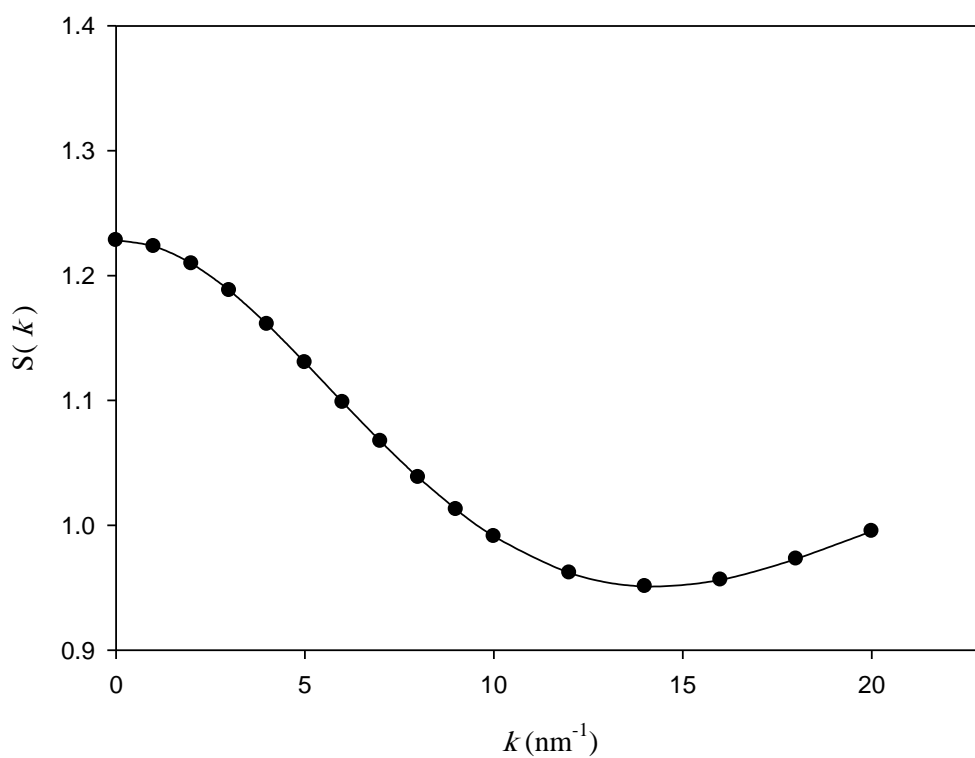
شکل (۳-۱۴) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای ۳۰۰ K و چگالی ۰.۳۳ mol/L.



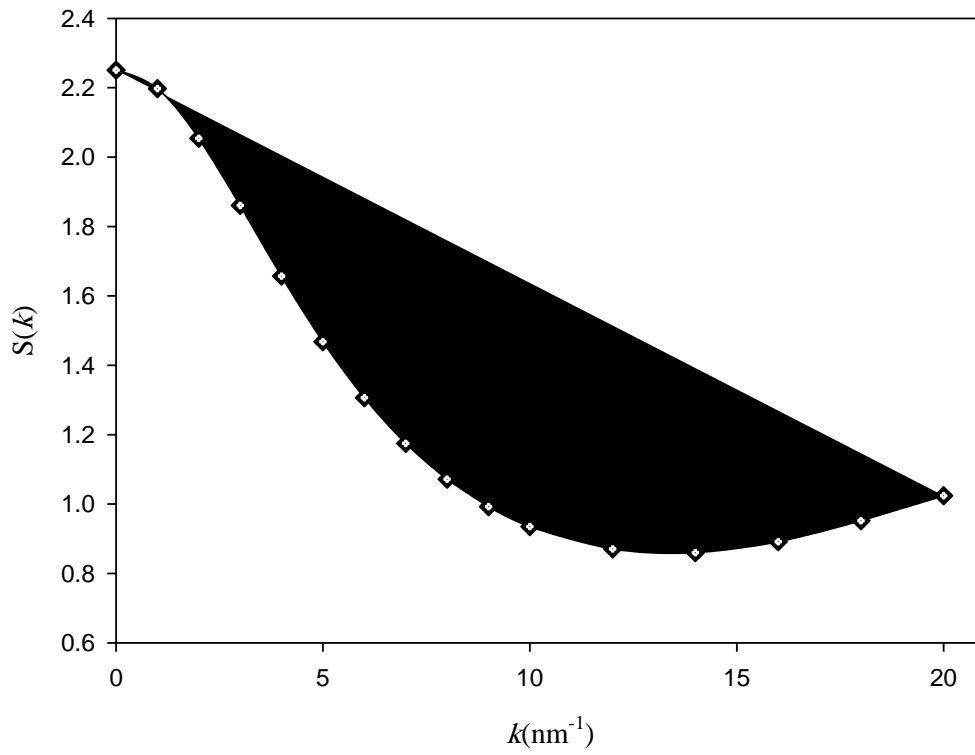
شکل (۳-۱۵)- رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $260 \text{ K}$  و چگالی  $0.76 \text{ mol/L}$ .



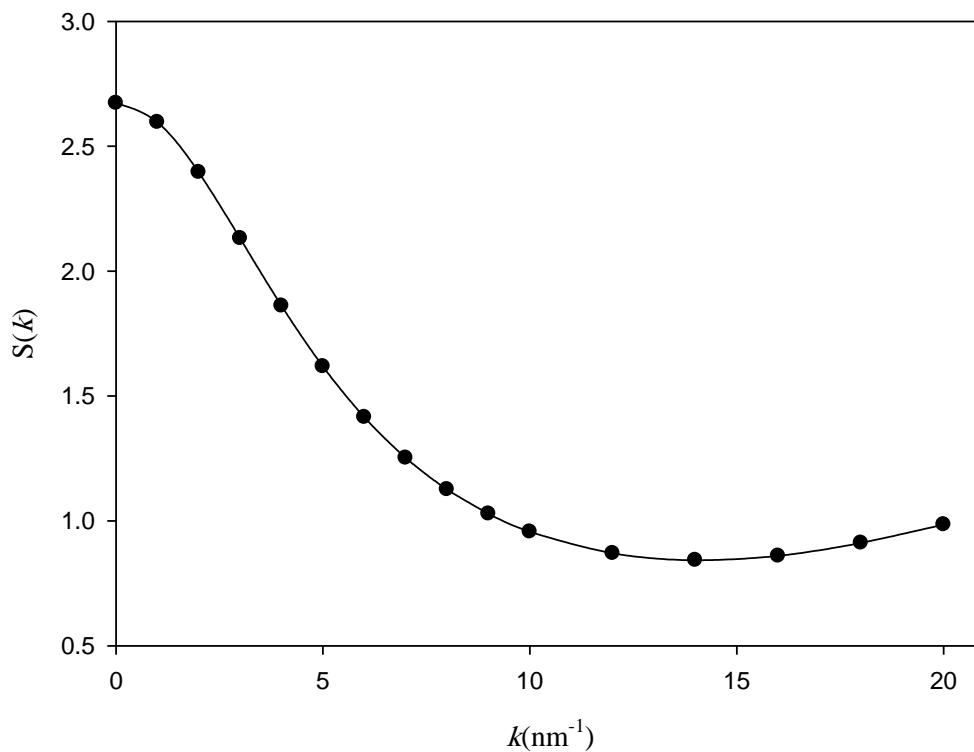
شکل (۳-۱۶)- رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای ۲۸۵ K و چگالی ۰/۷۶ mol/L.



شکل (۳-۱۷)- رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $300 \text{ K}$  و چگالی  $0.076 \text{ mol/L}$ .



شکل (۳-۱۸)- رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $285 \text{ K}$  و چگالی  $0.228 \text{ mol/L}$ .

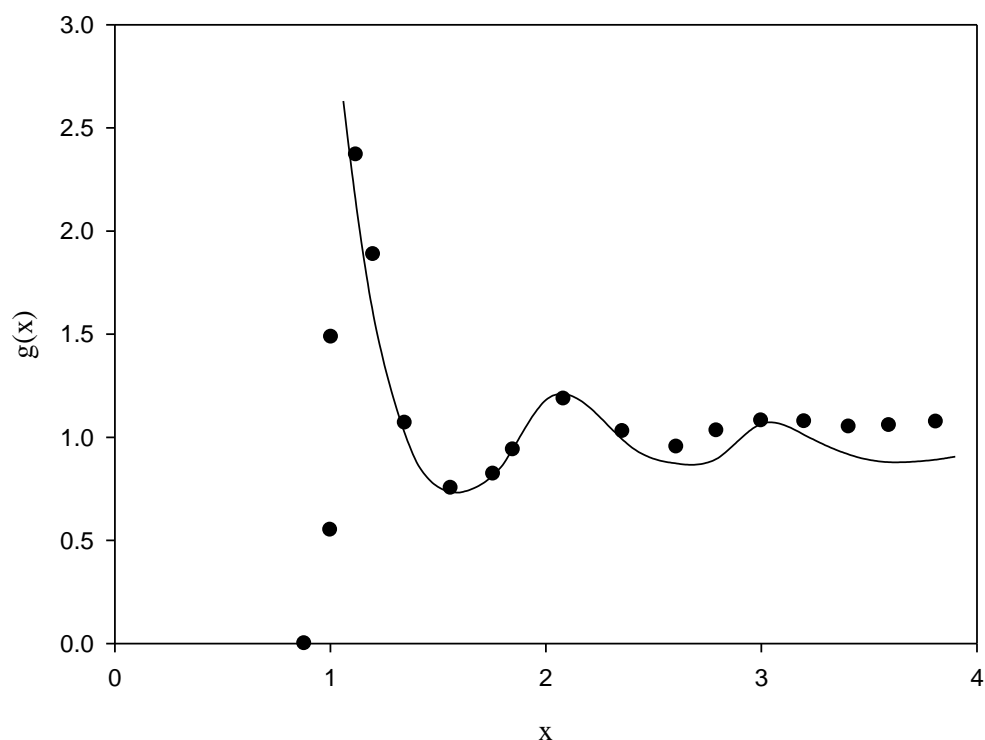


شکل (۳-۱۹) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در  $k$  کم بر حسب بردار موج در دمای  $300 \text{ K}$  و چگالی  $3/04 \text{ mol/L}$ .

علی رغم مدل سیال کرات سخت که قادر به نشان دادن  $S(0)$  نبود این مدل به خوبی  $S(0)$  را نشان می‌دهد. همچنین این مدل قادر است  $S(k_{\min})$  در  $k$  کم که به سهم نیروهای جاذبه در بر-همکنش بین مولکولی سیستم برمی‌گردد را نشان دهد.

در فصل چهارم، ضمن مقایسه نتایج مدل‌های بیان شده با سایر نظریه‌های دیگر به بحث و نتیجه‌گیری نهایی می‌پردازیم.

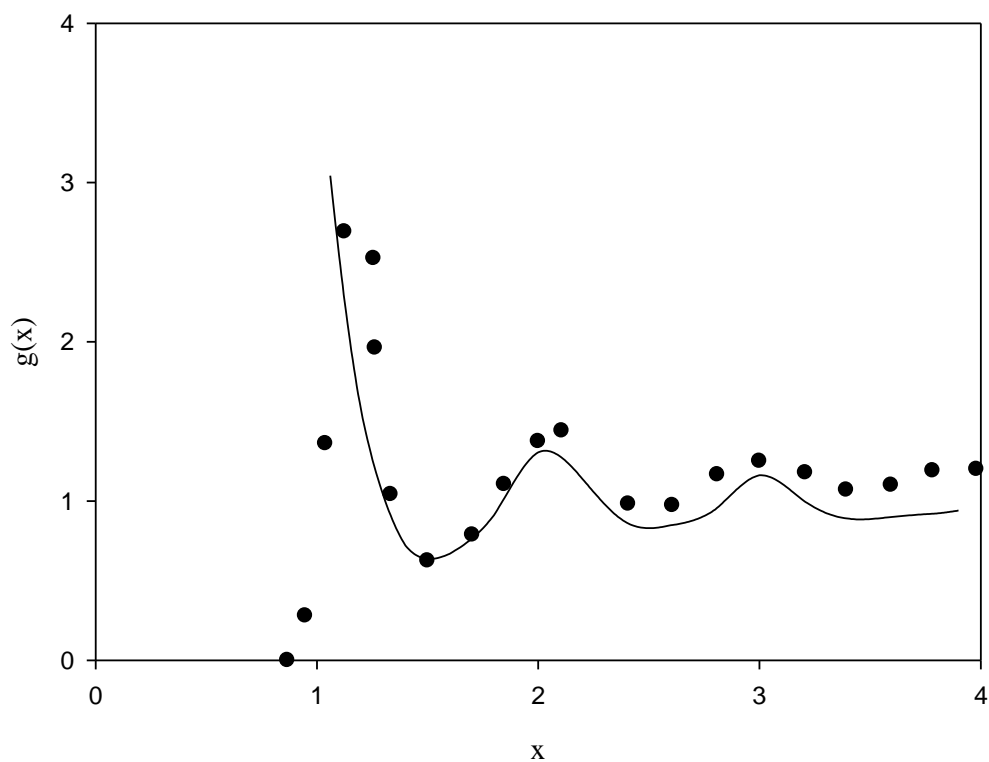
ما توانستیم در فصل گذشته با استفاده از عبارت تحلیلی تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت، توابع  $S(k)$  و  $g(r)$  سیال زنون و آرگون را در چگالی‌های مختلف ترسیم کنیم. در این فصل ضمن تحلیل نتایج به دست آمده سعی می‌گردد مقادیر محاسبه شده با داده‌های تجربی یا نظری قابل دسترس در سایر منابع مورد مقایسه قرار گیرد. در شکل‌های (۱-۴) و (۲-۴) تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت در چگالی کاهش یافته ۰/۷۵ و ۰/۸۵ با نتایج شبیه‌سازی ورلت<sup>۱</sup> [۲۳] مقایسه شده است.



شکل (۱-۴)- رفتار تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت (—) و نتایج شبیه‌سازی ورلت [۲۳] (●) در چگالی کاهش یافته ۰/۷۵ سیال حقیقی.

<sup>۱</sup>- Verlet





شکل (۲-۴) - رفتار تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت (—) و نتایج شبیه‌سازی ورت [۲۳] (●) در چگالی

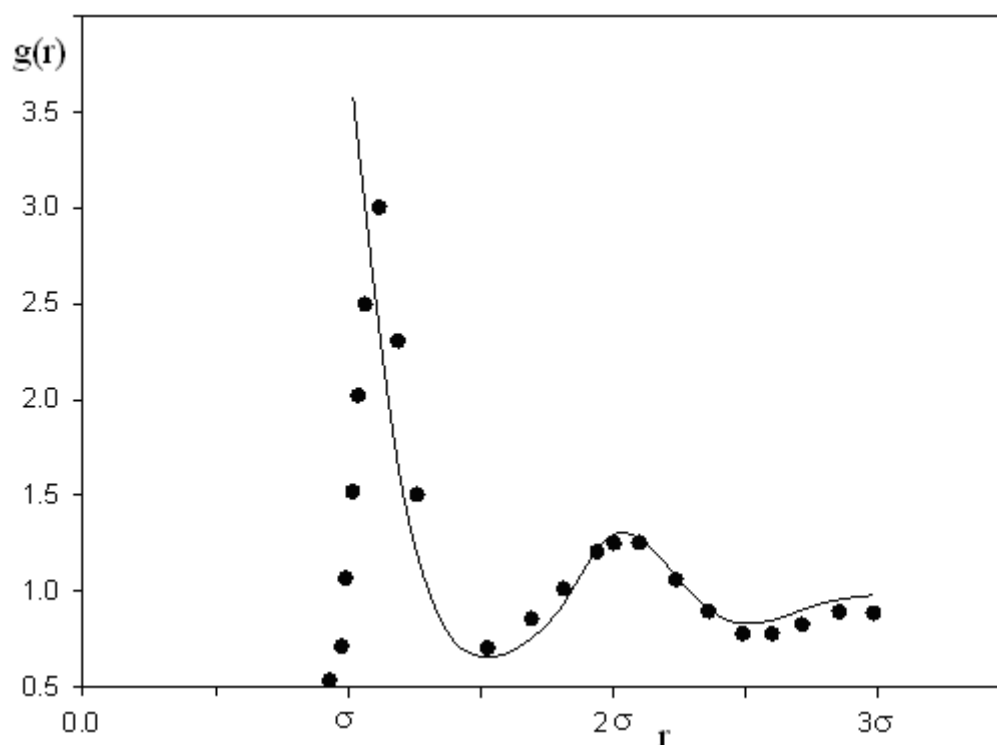
کاهش یافته ۰/۸۵ سیال حقیقی.

همانطور که در شکل‌های (۱-۴) و (۲-۴) ملاحظه می‌کنیم انطباق خوبی بین تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت با داده‌های شبیه‌سازی ورت [۲۳] برای سیال حقیقی مشاهده می‌شود. اما در ناحیه  $x < 1$  تفاوت میان دو نمودار آشکار می‌گردد. علت این تفاوت آن است که در سیال کرات سخت مولکول‌ها به صورت ذرات سخت و غیر قابل نفوذ در نظر گرفته می‌شوند که قادر به هم‌پوشانی نیستند. به همین دلیل بدیهی است که برای سیال کرات سخت تابع توزیع شعاعی در  $x < 1$  مفهومی ندارد، زیرا دو ذره تنها بر یکدیگر مماس شده و قادر نیستند در یکدیگر فرو روند، اما برای سیالات حقیقی می‌توان هم‌پوشانی دو ذره برخورد کننده را در نظر گرفت. بنابراین برای سیالات حقیقی تابع توزیع شعاعی در  $x < 1$  دارای مفهوم خواهد بود.

در ادامه ما تابع توزیع شعاعی سیال آرگون را با استفاده از مدل کرات سخت با داده‌های تجربی یارنل<sup>۱</sup> [۱۵] مقایسه نمودیم که انطباق قابل توجهی میان دو نمودار مشاهده گردید. اما در ناحیه  $x < 1$  تفاوت میان دو نمودار آشکار است که دلیل این امر به تفصیل بیان شد. از اینرو می‌توان از مدل سیال کرات سخت برای بررسی ساختار سیالات حقیقی در نواحی چگال به خوبی استفاده نمود.

---

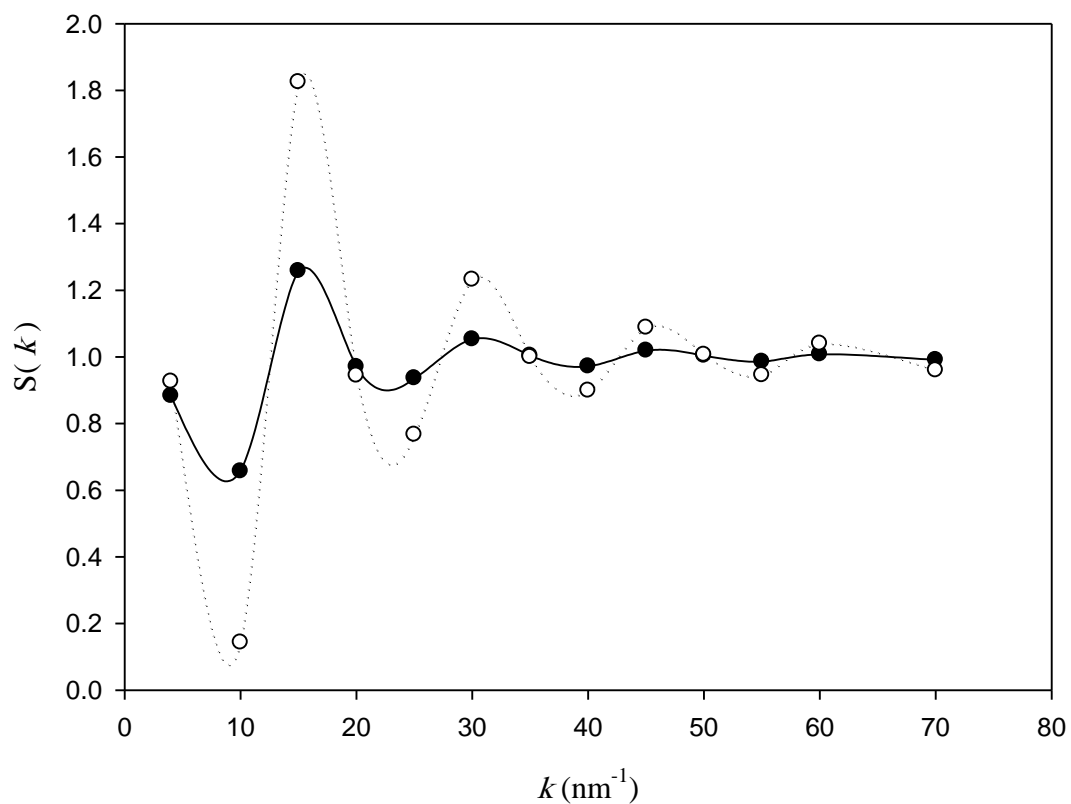
<sup>۱</sup> - Yarnell



شکل (۳-۴)- رفتار تابع توزیع شعاعی سیال آرگون با مدل کرات سخت (—) و داده‌های تجربی یارنل [۱۵] در چگالی  $0.35/38 \text{ mol/L}$  (●)

همانطور که قبلاً در فصل سوم بیان گردید، علاوه بر محاسبه و مطالعه تابع توزیع شعاعی سیالات ساده با استفاده از مدل کرات سخت می‌توان از آن جهت بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال نیز بهره گرفت. پس از این بررسی به این واقعیت دست یافتیم که در نواحی  $k$  کم استفاده از این مدل روند مناسبی برای فاکتور ساختار به دست نمی‌دهد. البته این امری بدیهی و قابل انتظار بود، زیرا نیروهای جاذبه نقش مهمی در رفتار فاکتور ساختار در  $k$  کم دارند و از آنجا که در مدل سیال کرات سخت سهم نیروهای جاذبه در نظر گرفته نشده است بنابراین این مدل در نشان دادن رفتار فاکتور ساختار در  $k$  کم کارآمد نیست.

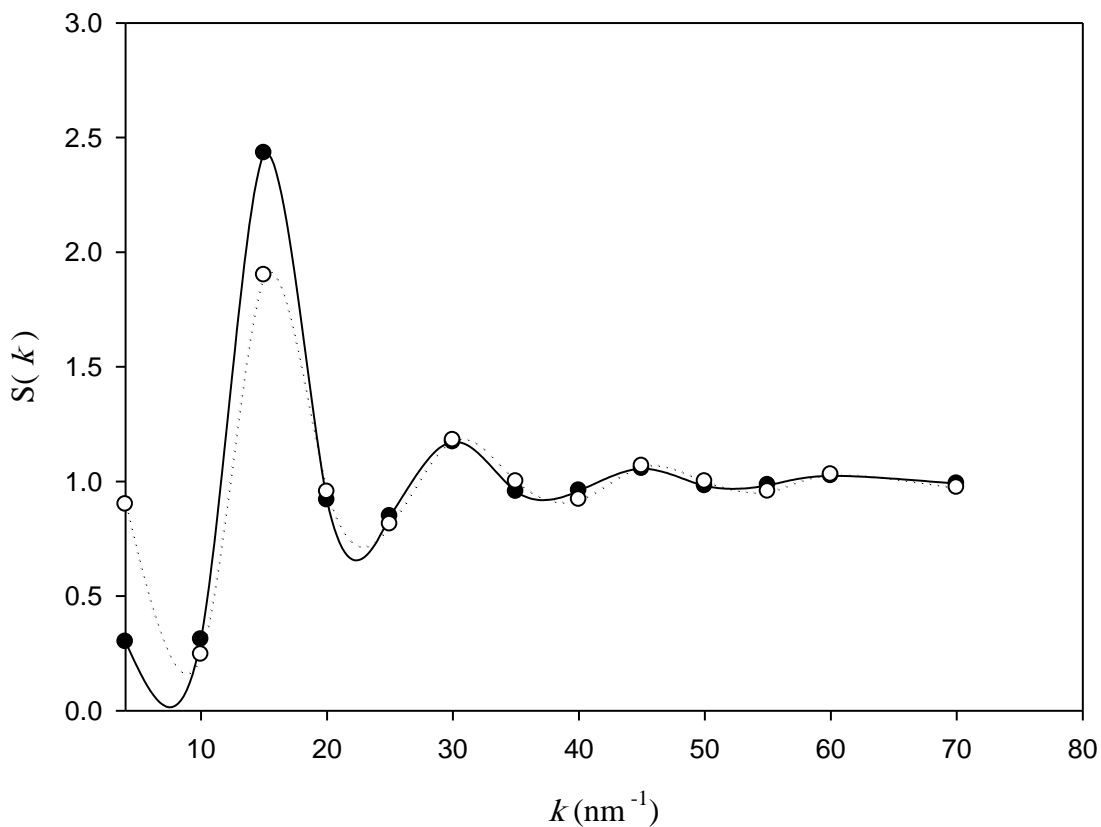
اما از آنجا که برای محاسبه فاکتور ساختار در ناحیه  $k$  بالا، استفاده از یک مدل پتانسیل که سهم دافعه بین مولکولی را به خوبی شامل شود کافی است، بنابراین ما از مدل پتانسیل کرات سخت برای بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در نواحی  $k$  بالا استفاده نمودیم. در شکل (۴-۴) نتیجه این محاسبات برای دو چگالی مختلف سیال زنون ترسیم شده است.



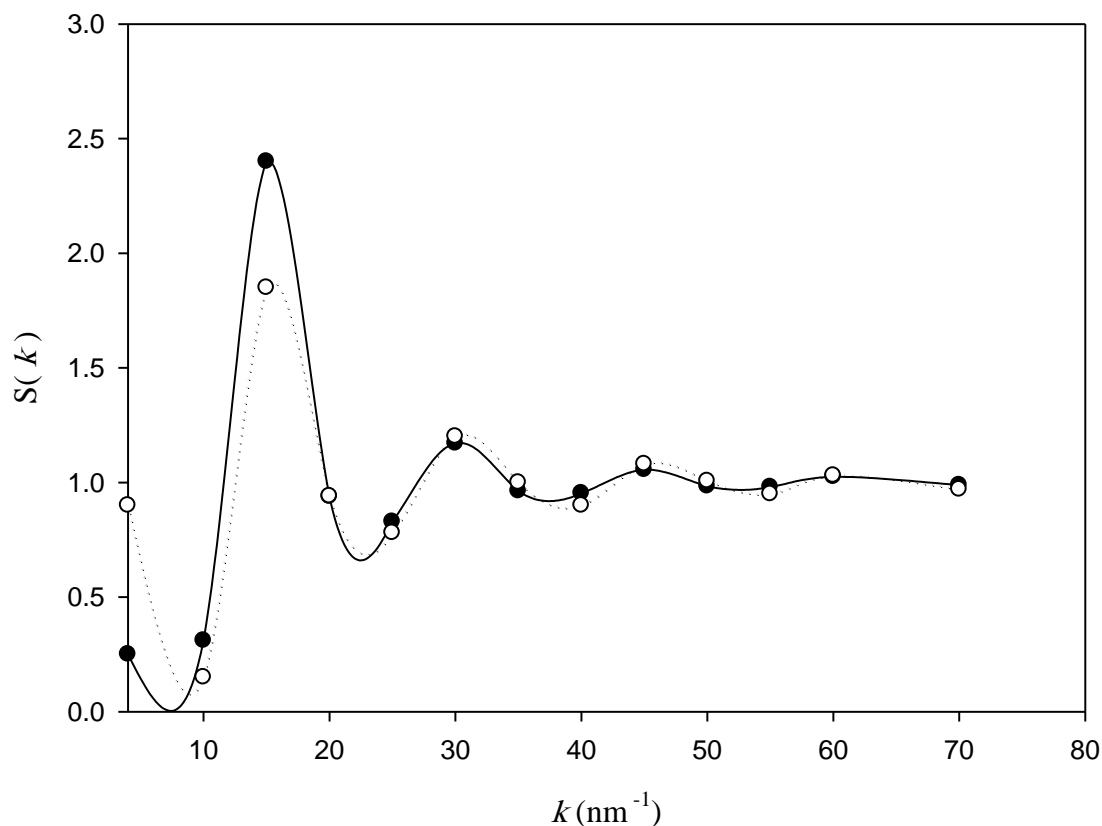
(۴-۴) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی  $۸/۳۸ \text{ mol/L}$  (●—) و چگالی  $۱۸/۴۶ \text{ mol/L}$  (○⋯).

شکل (۴-۴) رفتار صحیح  $S(k)$  را در چگالی‌های متفاوت نشان می‌دهد به طوری که با افزایش چگالی ارتفاع برآمدگی‌ها و نیز فرو رفتگی دره‌ها افزایش می‌یابد.

ما برای بررسی بیشتر مدل ارائه شده نتایج آن را با مدل‌های دیگر مقایسه نمودیم. مدلی که ما برای مقایسه کردن از آن بهره گرفته‌ایم مدلی است که در آن سهم جاذبه در پتانسیل برهم‌کنش‌ها لحاظ شده و از معادله حالت LIR استفاده شده است. برای چگالی‌های  $16/35 \text{ mol/L}$  و  $16/46 \text{ mol/L}$  این محاسبات انجام شده و نتایج در شکل‌های (۴-۵) و (۴-۶) مقایسه شده است.



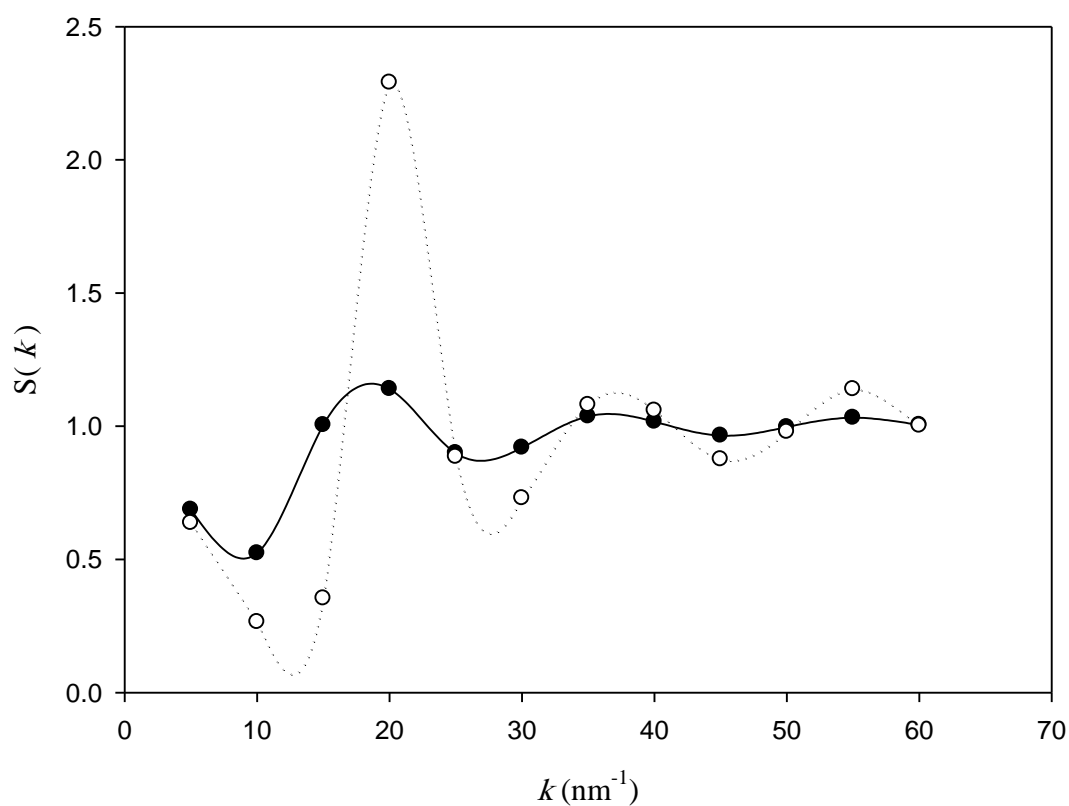
شکل (۴-۵) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی  $16/35 \text{ mol/L}$  با استفاده از مدل سیال کرات سخت (○⋯⋯) و مدل مرجع [۸۶] (●—).



شکل (۴-۶) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در چگالی  $18/46 \text{ mol/L}$  با استفاده از مدل سیال کرات سخت (○⋯⋯○) و مدل مرجع [۸۶] (●—●).

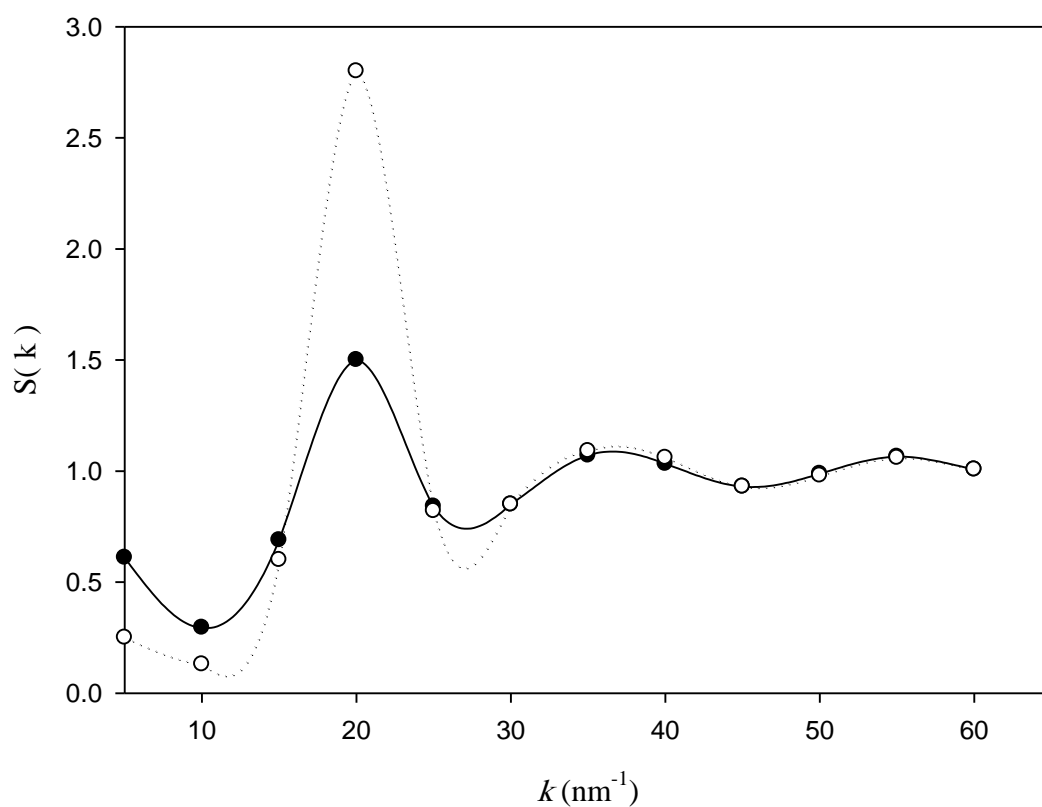
همانطور که در شکل‌های (۴-۵) و (۴-۶) ملاحظه می‌کنیم توافق خوبی بین مدل به کار گرفته شده و مدل مرجع [۸۶] مشاهده می‌شود. تفاوت میان دو نمودار در  $k$  پایین کاملاً مشهود است که این اختلاف از آنجا ناشی می‌شود که مدل سیال کرات سخت فاقد سهمی برای جاذبه است و این ناحیه به سهم نیروهای جاذبه سیال اشاره دارد، اما از انطباق نتایج در مقادیر  $k$  بالا می‌توان نتیجه گرفت که نیروهای دافعه کوتاه برد نقش اصلی را در ساختار سیال چگال دارند و نقش نیروهای جاذبه در ساختار سیستم اندک است.

ما مطالعات خود را علاوه بر سیال زنون بر روی سیال آرگون نیز انجام دادیم و برای این سیال نیز رفتار فاکتور ساختار در  $k$  بالا را با استفاده از مدل سیال کرات سخت بررسی کردیم. با بررسی رفتار فاکتور ساختار در چگالی‌های مختلف به روندی مشابه با سیال زنون دست یافتیم.



شکل (۴-۷) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون با استفاده از مدل سیال کرات سخت در چگالی  $۱۶/۷۵ \text{ mol/L}$  (●—) و چگالی  $۳۳/۵۱ \text{ mol/L}$  (○⋯).

در مورد سیال آرگون نتیجه محاسبه شده از مدل با مدل مرجع [۲۲] مقایسه گردیده که در شکل (۴-۸) نشان داده شده است.



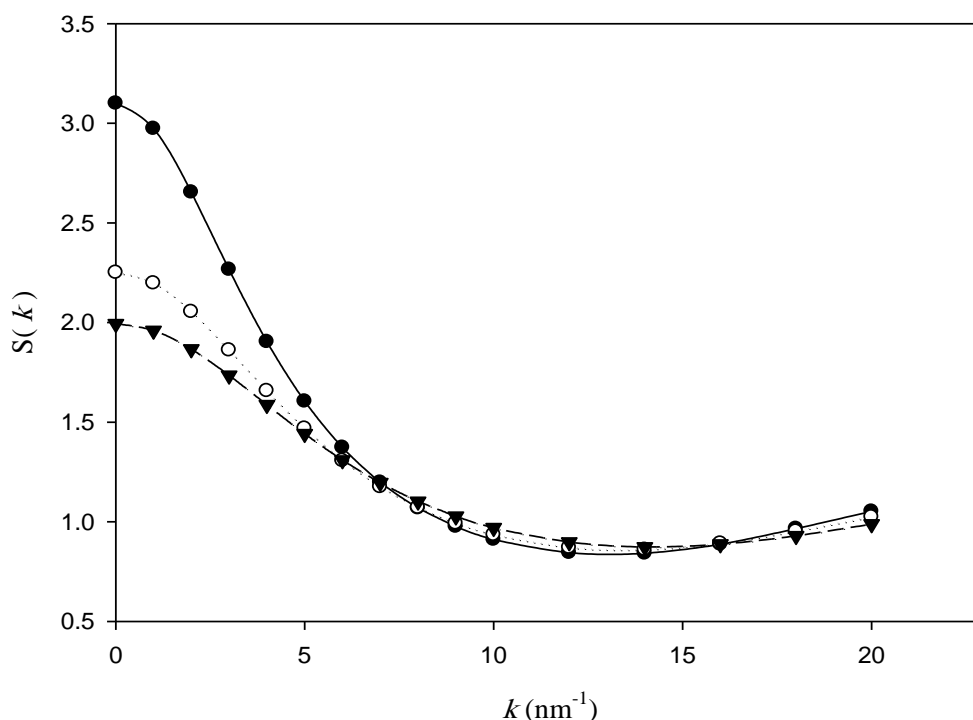
شکل (۴-۸) - رفتار فاکتور ساختار سیال آرگون در چگالی ۲۴/۵۸ mol/L با استفاده از مدل سیال کرات سخت (●—) و مدل مرجع [۲۲] (○⋯○).

همانطور که در شکل (۴-۸) ملاحظه می‌شود در مورد آرگون نیز همانند رفتار سیال زنون در مقادیر  $k$  کم تفاوت میان دو مدل نمایان می‌گردد اما در نواحی  $k$  بالا رفتار دو مدل بر یکدیگر منطبق می‌شود که دلیل این روند قبلاً بیان شده است.



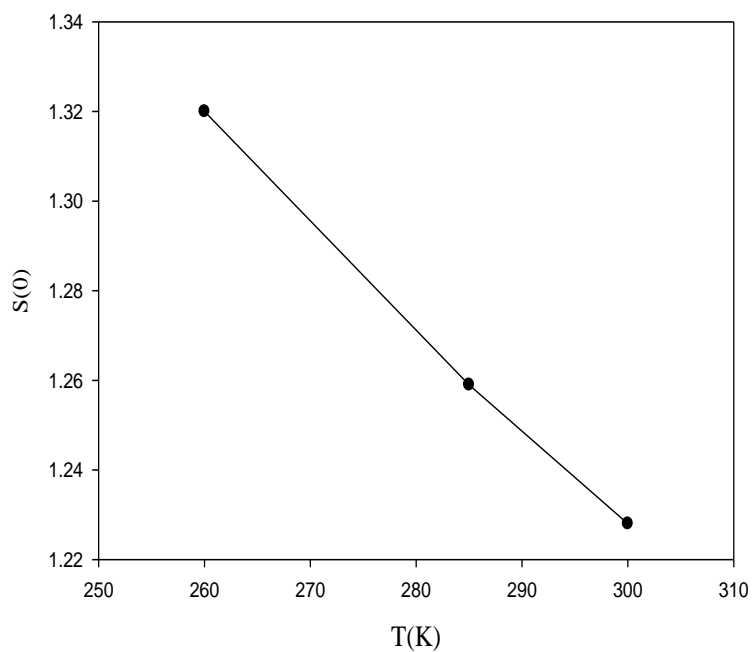
با توجه به اینکه مدل ارائه شده مبتنی بر سیال کرات سخت تنها در چگالی‌های بالا قابل استفاده است و برای مطالعه رفتار سیال در چگالی‌های پایین عبارت تحلیلی مناسبی برای تابع توزیع شعاعی در دسترس نمی‌باشد، بنابراین برای بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در ناحیه  $k$  کم به ویژه در نواحی چگالی پایین نیاز به مدل دیگری احساس می‌شود.

این مدل بر اساس تعریفی از تابع همبستگی مستقیم شکل گرفته است که در آن تابع  $c(r)$  بر اساس روش اختلال به دو سهم مرجع و اختلال تقسیم شده است. قسمت مرجع تابع  $c(r)$  برابر با تابع همبستگی مستقیم سیال کره‌ی سخت در نظر گرفته شده که برای نرم شدن دافعه سخت آن از مفهوم قطر مؤثر استفاده گردیده است. برای سهم دنباله آن نیز از یک عبارت نمایی استفاده شده است و پارامترهای تنظیم پذیر در قسمت مرجع و دنباله از روی اطلاعات  $PVT$  سیال در هر دما و چگالی قابل محاسبه هستند. این مدل در نواحی چگالی پایین که در این حالت نیروهای جاذبه سیستم غالب هستند دارای دقت بیشتری است. ما با استفاده از این مدل توانستیم رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در ناحیه  $k$  کم را مطالعه نمائیم.

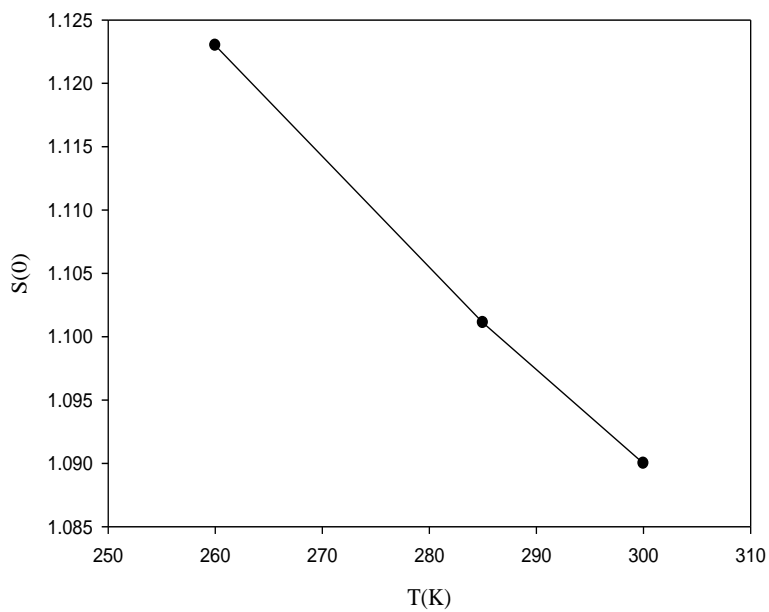


شکل (۹-۴) - رفتار فاکتور ساختار سیال زنون برای چگالی  $2/28 \text{ mol/L}$  در دماهای  $260 \text{ K}$  (●—●)،  $285 \text{ K}$  (○-○) و  $300 \text{ K}$  (▼-▼).

در شکل (۹-۴) رفتار فاکتور ساختار سیال زنون برای چگالی  $2/28 \text{ mol/L}$  در دماهای  $260 \text{ K}$ ،  $285 \text{ K}$  و  $300 \text{ K}$  مشاهده می‌شود. ملاحظه می‌کنیم که در یک چگالی ثابت با افزایش دما  $S(0)$  کاهش می‌یابد. با افزایش دما سهم نیروهای دافعه در سیال افزایش یافته به همین دلیل از مقدار  $S(0)$  که به نیروهای جاذبه مربوط است کاسته خواهد شد. نتایج مربوط به تغییرات  $S(0)$  در برابر دما برای چگالی‌های  $0/33 \text{ mol/L}$  و  $0/76 \text{ mol/L}$  نیز در شکل‌های (۱۰-۴) و (۱۱-۴) نمایش داده شده است که در تمامی این موارد با افزایش دما  $S(0)$  کاهش می‌یابد. دمای بحرانی زنون  $289/734 \text{ K}$  می‌باشد و ما مطالعات خود را در دماهای دورتر از دمای بحرانی انجام داده‌ایم.



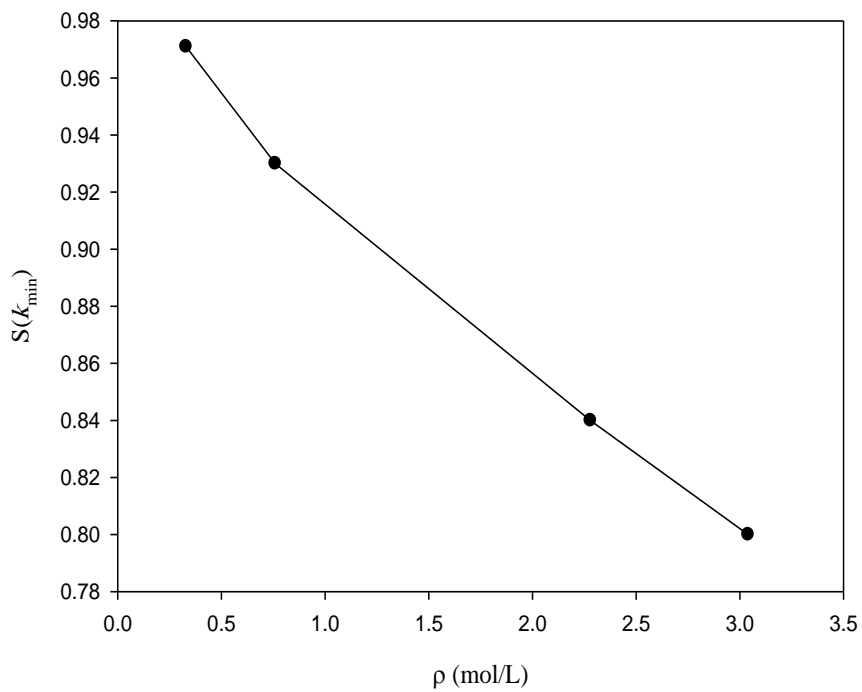
شکل (۴-۱۰) - تغییرات  $S(0)$  در برابر دما در چگالی ثابت  $0.76 \text{ mol/L}$



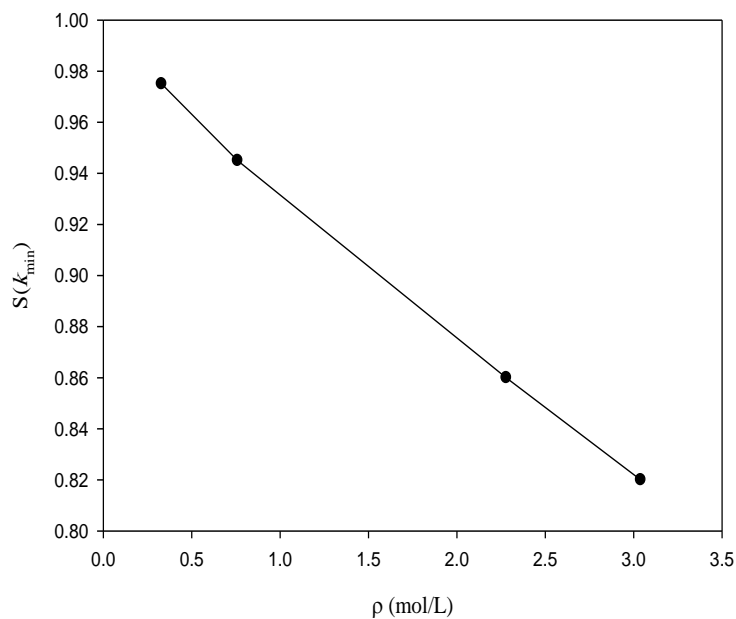
شکل (۴-۱۱) - تغییرات  $S(0)$  در برابر دما در چگالی ثابت  $0.33 \text{ mol/L}$

همچنین این مدل روندی نزولی برای تغییر  $S(k_{\min})$  در برابر تغییرات چگالی در دمای ثابت پیش -

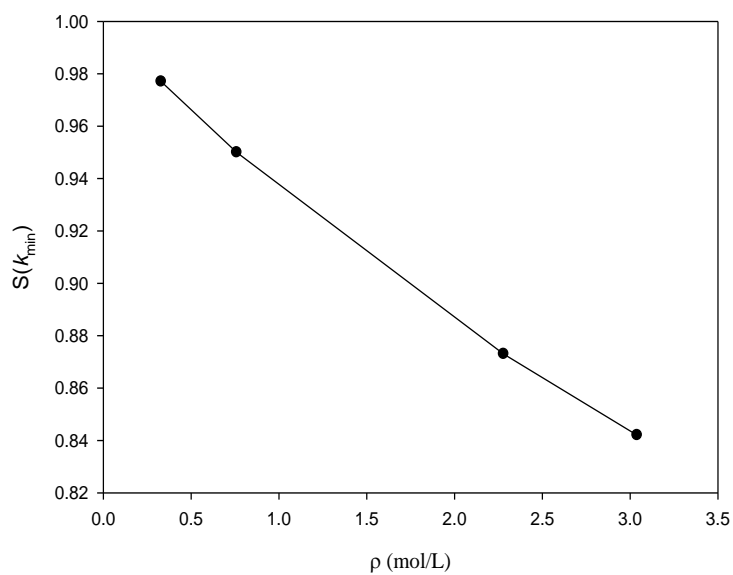
بینی می نماید.



شکل (۴-۱۲) - تغییرات  $S(k_{\min})$  در برابر چگالی،  $\rho$ ، در دمای  $260\text{ K}$ .



شکل (۴-۱۳) - تغییرات  $S(k_{\min})$  در برابر چگالی،  $\rho$ ، در دمای ۲۸۵ K.

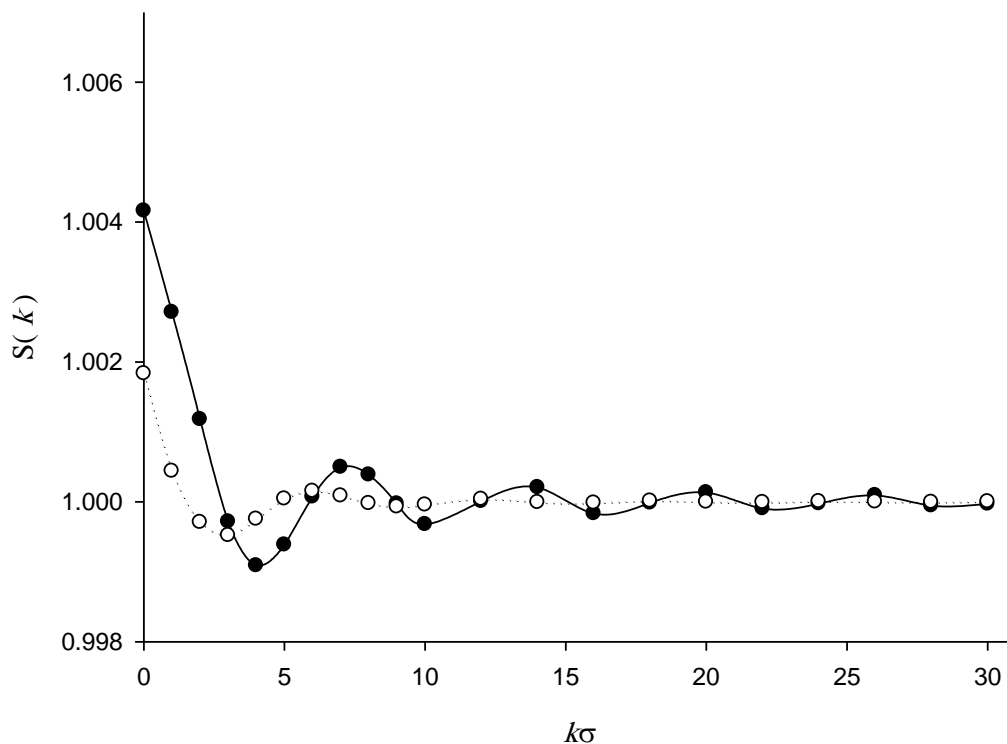


شکل (۴-۱۴) - تغییرات  $S(k_{\min})$  در برابر چگالی،  $\rho$ ، در دمای ۳۰۰ K.

همانطور که مشاهده می‌کنیم با افزایش چگالی  $S(k_{\min})$  کاهش پیدا می‌کند و این روند در

چندین دمای مختلف مشاهده می‌شود.

ما همچنین توانستیم رفتار  $S(k)$  در  $k$  کم را با نتایج حاصل از مدل‌های دیگر نیز مقایسه کنیم. در مدلی که برای مقایسه از آن بهره گرفته‌ایم از تعریفی متفاوت برای تابع همبستگی مستقیم استفاده شده که جزئیات آن در مرجع [۸۷] آورده شده است.



شکل (۴-۱۵) - رفتار فاکتور ساختار بر حسب بردار موج کاهش یافته،  $k$ ، در چگالی  $0.33 \text{ mol/L}$  بر اساس مدل پیشنهادی (●) و مدل مرجع [۸۷] (○).

همانطور که در شکل (۴-۱۵) ملاحظه می‌شود در نواحی  $k$  بالا انطباق خوبی بین دو مدل مشاهده می‌شود و تفاوت در ناحیه  $k$  پایین به چگونگی انتخاب سهم دنباله در تابع همبستگی مستقیم در مدل‌های مختلف برمی‌گردد. ما برای بهینه کردن پارامتر مربوط به قسمت دنباله مدل  $c(r)$  از معادله حالت ویرال مربوط به زنون استفاده کردیم در صورتی که در مدل مرجع [۸۷] از معادله حالت کارناهان برای بهینه کردن استفاده شده است.

## آینده نگری:

در این پایان نامه رفتار فاکتور ساختار سیالات ساده نظیر زنون و آرگون در نواحی چگالی بالا با استفاده از عبارت تحلیلی تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت بررسی گردید. در این روش عبارت تحلیلی مذکور تا ۴ برابر قطر مولکولی محاسبه گردید. با در اختیار داشتن ابر یارانه‌ها و کامپیوترهای پر سرعت که امکان محاسبه حجم وسیعی از محاسبات را در مدت زمان کوتاه فراهم می‌آورند، می‌توان محاسبات تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت را تا ۲۰ برابر قطر مولکولی پیش برد و به نتایج دقیق تری دست یافت.

از آنجا که عبارت تحلیلی مربوط به تابع توزیع شعاعی سیال کرات سخت فاقد سهمی برای برهم-کنش‌های جاذبه است اگر از توابعی استفاده شود که سهم برهم-کنش‌های جاذبه را شامل شود آنگاه نتایج مطلوب تری حاصل خواهد شد. برای این منظور می‌توان از مدل‌های پتانسیل که دارای سهم جاذبه هستند نظیر مدل لnard-جونز و مدل چاه مربعی برای به دست آوردن معادله تحلیلی  $g(r)$  بهره گرفت. در هر صورت، مدل‌هایی که تعداد پارامتر تنظیم پذیر کمتری داشته باشند در اولویت قرار دارند.

همچنین برای بررسی رفتار فاکتور ساختار سیال زنون در نواحی چگالی پایین از مدلی استفاده گردید که بر اساس تعریفی برای تابع همبستگی مستقیم بنا شده بود. همانطور که قبلاً بیان گردید در این مدل پارامترهای تنظیم پذیری وجود دارند که با استفاده از معادله حالت ویريال زنون به بهینه کردن آنها پرداختیم. با توجه به دقت مورد انتظار ما معادله حالت ویريال زنون را تا ضریب دوم ویريال استفاده نمودیم. در صورتی که با داشتن کامپیوترهای پر سرعت امکان محاسبه ضرایب سوم، چهارم و... میسر می‌گردد و می‌توان به معادله حالت دقیق تری دست یافت و به تبع آن به نتایج دقیق تری برای پارامترهای تنظیم پذیر رسید. از آنجا که ما توانستیم مقادیر  $S(0)$  را در حالت‌های ترمودینامیکی مختلف محاسبه نمائیم، لذا می‌توان از این مدل در ناحیه نزدیک به فوق بحرانی جهت بررسی پدیده‌ی افت وخیز بحرانی نیز استفاده کرد.

اگر چه در این پایان نامه نتایج مدل با مدل‌های نظری قابل دسترس مقایسه گردید و انطباق قابل ملاحظه‌ای نیز بین آنها مشاهده شد، اما اگر بتوان به داده‌های تجربی در نواحی مختلف ترمودینامیکی مورد مطالعه در مراجع مختلف دسترسی پیدا کرد، آنگاه با مقایسه مدل با این داده‌ها می‌توان به صحت بیشتر نتایج مدل پی برد.

در نهایت با توجه به رابطه بین تابع  $S(k)$  و تابع  $g(r)$  با پیش‌بینی صحیح تابع  $S(k)$  در گستره وسیعی از  $k$  می‌توان تابع  $g(r)$  را برای سیال پیش‌بینی نمود و با داشتن آن سایر خواص ترمودینامیکی سیال مشخص می‌گردد. با توجه به پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی سیالات توسط مدل ارائه شده، نتایج آن می‌تواند در صنایعی که با انتقال سیالات و تعادل فازها مرتبط هستند به کارگیری شود.



- [۱]- Goodstein D. L. (1985) “*State of Matter*” , Dover Phoenix Publications.
- [۲]- Sutton A. P. (1993), “*Electronic Structure of Materials*”, Oxford science publication, pp.10.
- [۳]- <http://www.lsbu.ac.uk/water/phase.html>.
- [۴]- Wahab M. A. (2005), “*Solid State Physics: Structure and properties of materials*”, edition 2, Alpha Science International, Ltd, pp.3.
- [۵]- White F. (2003), “*Fluid mechanics*”, edition 6, McGraw-Hill, pp.4.
- [۶]- Turell G. (1997), “*Gas –Dynamics: Theory and Applications*”, John Wiley & Sons, pp.3.
- [۷]- Croxton C. A. (1978), “*Introduction to liquid state physics*”, John Wiley, New York.
- [۸]- Minkei J. R. (2009), “*Strange but true: Super fluid can climb walls*”, Scientific American.
- [۹]- <http://web.mit.edu/newsoffice/2005/matter.html>.
- [۱۰]- Murthy G. et al. (1997) “*Superfluids and supersolids on frustrated two dimensional lattices*”, Phys.Rev.B, 5, 55, pp 3104.
- [۱۱]- پارسافر غ، (۱۳۸۶) ترمودینامیک آماری: مبانی و کاربردها جلد اول، چاپ دوم، مرکز نشر دانشگاه صنعتی، اصفهان.
- [۱۲]- Pryde J. A. (1966), “*The liquid state*”, Hutchinson University Library.
- [۱۳]- McQuarri D. A. (1973) , “*Statistical Mechanics*”, Harper and Row, New York.
- [۱۴]- Munster A. (1974) “*Statistical Thermodynamics*”, Vol. 2, Harcourt Brace Jovanovich, New York.
- [۱۵]- Yarnell J. L. and Katz M. J. and Wenzel R. G. (1973) “*Structure factor and radial distribution function for liquid argon at 85K*”, Phys. Rev. A, 6, 7, pp 2130.
- [16]- Egelstaff P. A. (1967) “*An Introduction to Liquid State*”, Academic, London, pp.21-22.
- [۱۷]- Matteoli E. and Mansoori G. A. (1995) “*A simple expression for radial distribution functions of pure fluids and mixtures*” J. of .Chem.Phys., 11, 103, pp 4672.

[١٨]- Touba H.and Mansoori G. A. (1997) “*An Analytic Expression for the First Shell of the Radial Distribution Function*” J.of .Thermophys., 5, 18, pp 1217.

[١٩]- Berry R. S.and Rice S. A. and Ross J. (1980), “*Physical chemistry*”, John wiley, New York.

[٢٠]- Touba H.and Mansoori G. A. and Matteoli E. (1998) “*Subcritical and supercritical water radial distribution function*” J.of .Thermophys., 5, 19, pp 1447.

[٢١]- Ornstein A. S. and Zernick F. (1914) “*Accidental deviation of density and opalescence at the critical point of a single substance*”, Proc. Akad. Sci., 17, pp 793.

[٢٢]- Keshavarzi E.and Parsafar G. A. (2000) “*The direct correlatoni function and Its Interpretation Via the Linear Isotherm Regularity*” J. of .Phys. Soc. Jpn., 7, 70, pp 1979.

[٢٣]- Verlet L. (1968) “*Computer "Experiments" on Classical Fluids. II. Equilibrium Correlation Functions*”, Phys.Rev., 1, 165, 201.

[٢٤]- Vazquez O.and Herrera J. N. and Blum L. (2003) “*Static structure factor and thermodynamic properties of a binary Yukawa mixture*” J. of .Physica A, 3, 352, pp 319.

[٢٥]- Barker J. A. and Fisher R. A. and Watts R. O. (1971) “*Liquid argon: Monte carlo and molecular dynamic calculations*” J. of .Mol.Phys., 4, 21, pp 657.

[٢٦]- Teitsma A.and Egelstaff P.A. (1980) “*Three- body- potential contribution to the structure of krypton gas*”, Phys. Rev.A, 1, 21, pp 367.

[٢٧]- <http://en.wikipedia.org/wiki/structure-factor>.

[٢٨]- Henderson D.and Davison S. J. (1967) “*Statistical Mechanics*”, edited Eyring H. Academic, New York, Chap. 7.

[٢٩]- Percus J. K. and Yevick G. L. (1958) “*Analysis of Classical Statistical Mechanics by Means of Collective Coordinates*” J. of .Phys.Rev., 1, 110, pp 1.

[٣٠]- <http://www.wikipedia.org/wiki/Hard-spheres>.

- [٣١]- Staff (2007) “*Xenon*”, Columbia Electronic Encyclopedia Columbia University Press.
- [٣٢]- Husted R. and Mollie B. (2003) “*Xenon*”, Los Alamos, National Library, Chemical Division.
- [٣٣]- Rabinovich V. and Vasserman A. A. and Nedostup V. L. and Veksler L. S. (1988) “*Thermodynamic properties of neon , argon, krypton and xenon*” , Vol. 10, Hemisphere publishing crop, Washington.
- [٣٤]- Freemantel M. (2003) “*Chemistry at its Most Beautiful*”, Chemical & Engineering News.
- [٣٥]- Kaneoka L. (1998) “*Xenons in Side Story*”, Science magazine., 5365, 280, pp 851.
- [٣٦]- Stacey W. M. (2007) “*Nuclear Reactor Physics*”, 2 edition, Wiley- VCH, Berlin, pp.213.
- [٣٧]- Williams D. (2007), “*Earth fact sheef*”, NASA.
- [٣٨]- Aprile E. and Bolotnikov A. E. and Doke T. (2006), “*Noble gas detectors*”, 1 edition, Wiley-VCH”, pp.8.
- [٣٩]- Caldwell W. A. and Nguyen J. and Pfrommer B. and Louie S. and Jeanloz R. (1997) “*Structure, bonding and geochemistry of xenon at high pressures*” , Science magazine., 5328, 277, pp. 930.
- [٤٠]- Fontes E. (2009), “*Golden Anniversary for Founder of High-pressure Program at CHESS*” , Cornell university.
- [٤١]- Eremets M. and Gregoryanz E. A. and Struzhkin V. V. Mao H. K. and Hemley R. J. and Mulders N. and Zimmerman N. M. (2000) “*Electrical conductivity of xenon at megabar pressure*”, Phys.Rev.Lett., 13, 85, pp 2797.
- [٤٢]- Kerry F. G. (2007), “*Industrial gas handbook: Gas separation and purification*”, CRC, pp.101.
- [٤٣]- Singh S. (2005) “*Xenon: A modern anaesthetic*”, Indian Express Newspapers Limited.
- [٤٤]- Week J. L. and Chernick C. and Matheson M. S. (1962) “*Photochemical preparation of xenon difluoride*” J. of .Am.Chem.Soc., 23, 84, pp 4612.
- [٤٥]- Zhou M. and Zhao Y. and Gong Y. (2006) “*Formation and characterization of the Xe OO<sup>+</sup> cation in solid argon*”, J. of .Chem.Soc.American., 128, pp 2504.
- [٤٦]- Mackay K. M. and Mackay R. A. and Henderson W. (2002), “*Introduction to modern inorganic chemistry*”, 6 edition, CRC Press, pp.497-501.
- [٤٧]- Burke J. (2003) “*Twin Tracks: The unexpected origins of the modern world*”, Oxford University press, pp.33.

- [٤٨]- Toyserkain E. and Khajepour A. and Corbin S. (2004), “*Laser cladding*”, CRC Press, pp.48.
- [٤٩]- Patel C. K. N. and Bennett W. R. and Faust W. L. and Mc Farlane R. A. (1962) “*Infrared spectroscopy using stimulated emission techniques*”, Phys.Rev.Lett., 3, 9, pp 102.
- [٥٠]- Patel C. K. N. and Faust W. L. Mc Farlane R. A. (1962) “*High gain gaseous (Xe-He) optical masers*”, Appl Phys.Lett., 4, 1, pp 84-85.
- [٥١]- Bennett W. R. (1962) “*Gaseous optical masers*” J. of .Appl.Opt., 21, 1, pp 24.
- [٥٢]- Vander wall E. (1992), “*What is New in cardiac imaging? SPECT, PET, and MRP*”, Kluwer Academic publisher, Netherlands.
- [٥٣]- Frank J. (1999), “*Introduction to imaging: The chest*”, Student BMJ12, pp 1-44.
- [٥٤]- Chandak P. K. (1995), “*Brain SPECT: Xenon-133*”, Brigham RAD.
- [٥٥]- [http://www.sv.vt.edu/classes/MSE2094\\_NoteBook/MolecDyn/hs.html](http://www.sv.vt.edu/classes/MSE2094_NoteBook/MolecDyn/hs.html).
- [٥٦]- <http://www.wikipedia.org/wiki/molecular-dynamics>.
- [٥٧]- <http://www.cs.princet.n.edu/introcs/assignments/collisions.html>.
- [٥٨]- <http://www.ccr.buffalo.edu/etomica/app/modules/cites/LjNd/Back ground1.html>.
- [٥٩]- Hill T. L. (1956), “*Statistical mechanics*”, Mc Graw-Hill, New York.
- [٦٠]- Wallace D. C. (1987) “*On the role of density-fluctuations in entropy of a fluid*” J. of .Chem.Phys., 87, 4, pp 2282.
- [٦١]- Aranyai A. B. and Evans D. J. (1989) “*Direct entropy calculation from computer simulation of liquids*”, Phys.Rev.A, 7, 40, pp 3817-3822.
- [٦٢]- Bird R. B. and Stewart W. E. (2002), “*Transport phenomena*”, Second , John Niley & Sons, Inc, New York.
- [٦٣]- Hirschfelder J. O. and Curtiss C. F. and Bird R. B. (1954), “*Molecular theory of gases and liquids*”, John Wiley & Sons, New York.
- [٦٤]- Throop G. J. and Bearman R. J. (1966) “*The pair correlation function and thermodynamic properties for the Lennard-Jones 6-12 potential and Percus-Yevick equation*” J. of .Physica., 7, 32, pp 1298.
- [٦٥]- Watts R. O. (1969) “*Percus-Yevick Approximation for the Truncated Lennard-Jones (12,6) Potential Applied to Argon*” J. of .Chem.Phys., 2, 50, pp 984.
- [٦٦]- Kambayashi S. and Hiwatari Y. (1993) “*Molecular dynamics study of static and dynamic properties of supercooled soft-sphere fluids*” J. of .Non-Cryst.Solids., 156-158, pp 80.
- [٦٧]- Goldstein L. (1951) “*On the Theory of Coherent Scattering Processes in Liquids*” Phys.Rev., 3, 84, pp 466.

[۶۸]- Zernick F. (1916) “*The clustering tendency of the molecules in the critical state and the extinction of light caused thereby*” Proc.Akad.Sci., 18, pp1520.

[۶۹]- Zoppi M. and Bafile U. and Barocchi F. and Guarini E. and Magli R. and Neumann M.(1995) “*Microscopic structure and inter molecular potential in liquid Deuterium*” J. of .Phys.Rev.Lett., 75, pp 1779.

[۷۰] - Stell G. and Weis J. J. (1980) “*Structure and thermodynamics of a simple fluid*” J. of .Phys.Rev.A, 2, 21, pp 645.

[۷۱]- Verlet L.and Weis J. J. (1972) “*Equilibrium Theory of Simple Liquids*” J. of .Phys.Rev.A, 2, 5, pp 939.

[۷۲]- پراوسنیتس ج. ام، لیش تنتالر آر. ان، ازودو دی. گ، (۱۳۷۹) ترمودینامیک مولکولی تعادل‌های فازی سیال، جلد اول، مترجم وفاپی سفتی م، چاپ اول، نشر آثار علمی دانشگاه تربیت مدرس، تهران

[۷۳] - Weeks J. D. and Chandler D. and Andersen H. C. (1971), “*Role of repulsive forces in forming the equilibrium structure of simple liquids*”, J. of .Chem.Phys., 12, 54, pp5237.

[۷۴]- Keshavarzi E. and Nikoofard H. and Rostami A. (2004) “*Prediction of the long-range correlation length and the structure factor for monatomic fluids in the super critical region*” J. of .Phys.Soc.Jpn., 2, 73,pp 374.

[۷۵]- Gingrich N. S. and Heaton L. (1961) “*Structure of Alkali Metals in the Liquid State*” J. of .Chem.Phys., 3, 34, pp 873.

[۷۶]- Clayton G. T. and Heaton L. (1961) “*Neutron Diffraction Study of Krypton in the Liquid State*” J. of .Phys.Rev., 3, 121, pp 649.

[۷۷]- Lebowitz J. L. (1964) “*Exact Solution of Generalized Percus-Yevick Equation for a Mixture of Hard Spheres*” J. of .Phys.Rev., 4A, 133,pp A895.

[۷۸]- Wertheim M. S. (1963) “*Exact Solution of Percus-Yevick Integral Equation for Hard Spheres*” J. of .Phys.Rev.Lett., 8, 10, pp 321.

[۷۹]- Nixon J. H. and Silbert M. (1982) “*On the long- wavelength behaviour of the structure factor of classical fluids and its derivatives: a few general results*” J. of .Phys.C: Solid state phys., 7, 15, pp 165.

[۸۰]- Evans R. and Schirmacher W. (1978) “*The long wavelength limit of the liquid structure factor-a theory for the compressibility of liquid rare gases and metals*” J. of .Phys.C: Solid state phys., 12, 11, pp 2437.

[۸۱]- Smith W. R. and Henderson D. (1970) “*Analytical representation of the Percus-Yevick hard-sphere radial distribution function*” J. of .Molec.Phys., 3, 19,pp 411.

[۸۲]- Goodwin S. P. and Boughey J. D. and Heritage J. R. (1991) “*Calculation of the hard sphere radial distribution function*” J. of .Molec.Phys., 4, 75,pp 917-923.

[۸۳]- Henderson D. and Grundke E. W. (1975) "Direct correlation function: Hard sphere fluid" J. of Chem.Phys., 2, 63,pp 601.

[۸۴]- Sifner O. and Klomfar J. (1994) "Thermodynamic Properties of Xenon from the Triplet Point to 800 K with Pressures up to 350 MPa" J. of Phys.Chem.Ref.Data., 1, 23,pp 63.

[۸۵]- Hurly J. J. and Schmidt J. W. and Boyes S. J. and Moldover M. R. (1996) "Virial equation of state of Helium, Xenon, and Helium-Xenon mixture from speed-of-sound and Burnett  $P \rho T$  measurements", J. of Thermophys., 3, 18,pp 579.

[۸۶]- اسماعیلی الف، (۱۳۸۹)، پایان نامه ارشد: "مطالعه برهم کنش های بین مولکولی سیال زنون با استفاده از داده های آزمایش پراکندگی نوترونی در زاویه کوچک"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[۸۷]- حکیمی ف، (۱۳۸۹)، پایان نامه ارشد: "پیش بینی رفتار تابع همبستگی مستقیم گازهای نجیب با استفاده از توابع پتانسیل مؤثر"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

## Abstract

Recently many attempts have done for calculation of static structure factor,  $S(k)$ , of dense fluids. In the present work, we used the hard sphere radial distribution function to calculate the static structure factor for xenon fluid in different thermodynamic states. The evaluation of calculated structure factor for xenon fluid can be present behavior of  $S(k)$  in the extensive region of  $k$  for those of thermodynamic states with high density. The result of model was not satisfied for thermodynamic states with low density and we can not obtain the correct behavior of  $S(k)$  in small- $k$  region.

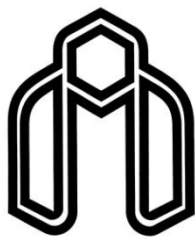
So we used this model for evaluation of structure factor behavior of xenon fluid in wide range of  $k$  for high densities. The similar studies for argon fluid yield the same results.

Since the model is not appropriate for studying in low densities and low- $k$  regions, we must be used other model for calculation of structure factor of xenon fluid in these thermodynamic states. The model that we used for this purpose is based on the definition of direct correlation function which can predict the structure factor behavior of xenon fluid for low densities and in low- $k$  region

This model can be show the correct behavior of  $S(k)$  in low- $k$ . The result shown that the value of  $S(0)$  decreases with increasing of temperature far from the critical temperature. Also, we observed that the value of  $S(k_{\min})$  decreases with increasing of density.

At the end the results of presented model with results of other models and differences and agreements between these models have compared.

**Key words:** Static structure factor, xenon fluid, radial distribution function, hard sphere fluid, direct correlation function, argon fluid



دانشگاه صنعتی شاهرود

Shahrood University of Technology

Faculty of Chemistry

Evaluation of static structure factor behavior of xenon fluid in  
low-k and in different thermodynamic states

By:

Toktam rezayi

Supervisor:

Dr. Hossein Nikoofard

Advisor:

Dr.Zahra Kalantar

September 2010