سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
بهینه سازی پارامترهای تابع پتانسیل لنارد جونز و ارائه مدلی جدید بر پایه مدل لنارد جونز

محل انتشار:
نخستین همایش مهندسی فرآیند در صنایع نفت، گاز، پتروشیمی و انرژی (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:
روزبه رمضانی - *دانشگاه شیراز، خیابان ملاصدرا، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز*

عبدالحسین جهانمیری - *استاد بخش مهندسی نفت دانشگاه شیراز*

خلاصه مقاله:
نیرو های بین مولکولی نقش عمده ای درتعیین رفتار سیستمها بر عهده دارند و از آنجاییکه این نیرو ها برخوردها و برهمکنشهای بین ذرات را کنترل می کنند، از اهمیت اساسی و بنیادی در تعیین بسیاری از خواص شیمیایی و فیزیکی توده ماده برخوردار می باشند و از این جهت مورد توجه طیف وسیعی از دانشمندان هستند. مناسب ترین و شایسته ترین معیار برای ارزیابی و سنجش نیروهای بین مولکولی، کمیت انرژی پتانسیل بین مولکولی می باشد. یکی از مدل های معروف و رایج برای تابع پتانسیل، مدل لنارد جونز می باشد. با توجه به اینکه مدل لنارد جونز برای مولکول های غیر قطبی و کوچک جواب خوبی می دهد ولی در همه ی مولکولها این مورد صدق نمی کند.در این پژوهش با بررسی روی مولکولهای متان، دی اکسید کربن، زنون، کریپتون، مونواکسیدکربن، آرگون، متیل کلرید و دی اکسیدگوگرد و استفاده از بهینه سازی با نرم افزار MATLABسعی در بهبود پارامترهای این مدل شده است. در نهایت چهار مدل مختلف برای پارامترهای تابع پتانسیل لنارد جونز ارئه گردید و بهترین مدل انتخاب شده است. همچنین نتایج بدست آمده از بهینه سازی با مقادیر تجربی مقایسه شده است و تطابق خوبی برای مدل انتخاب شده مشاهده شده است.

کلمات کلیدی:
بهینه سازی، تابع پتانسیل، لنارد جونز، نیرو بین مولکولی، ضریب دوم ویریال

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/200128