

ویژه نامه توسعه زنجیره فناوری های هیدروژنی

محاسبه خواص ترموفیزیکی گاز سنتز در فشار پایین با استفاده از پتانسیل بین مولکولی مورس-تعمیم یافته

ابراهیم نعمتی کنده^۱، علی مقاری^۲ و امیر حسین جلیلی^{۳*}

۱- دانشکده شیمی ارومیه، دانشگاه ارومیه، ایران

۲- دانشکده شیمی، دانشکدگان علوم پایه، دانشگاه تهران

۳- گروه فن آوری های تصفیه گاز، پژوهشکده فن آوری های فراورش و انتقال گاز، پژوهشگاه صنعت نفت

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۸/۰۵ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۲/۲۱

چکیده

در این پژوهش ابتدا پتانسیل بین مولکولی با استفاده از روش وارونی مستقیم داده های تجربی ویسکوزیته و ضریب دوم ویریال برای برهم کنش H_2-H_2 ، $CO-CO$ و H_2-CO به دست آمد. پتانسیل به دست آمده توسط مدل سه ضابطه ای مورس-چند جمله ای-وندروالس (MSV) برازش گردید. سپس با استفاده از مدل MSV خواص انتقالی (شامل ویسکوزیته، ضریب نفوذ و نفوذپذیری گرمایی) و همچنین ضریب دوم ویریال برای هیدروژن خالص، کربن مونواکسید خالص و مخلوط هیدروژن-کربن مونواکسید محاسبه گردید. مقایسه مقادیر محاسبه شده در این کار با داده های تجربی معتبر نشان می دهد که پتانسیل بین مولکولی MSV، با میانگین درصد انحراف نسبی بسیار پایین (برای ویسکوزیته $AAD=0/61\%$ و برای ضریب نفوذ $AAD=1/15\%$)، خواص ترموفیزیکی سیستم های خالص و مخلوط فوق الذکر را با صحت بسیار بالایی نسبت به روش های مبتنی بر حالات متناظر چانگ ($AAD=8/97\%$)، لوکاس ($AAD=2/87\%$) و سوپرترپ ($AAD=4/00\%$) به دست می دهد. در این مقاله مقادیر عددی خواص ترموفیزیکی هیدروژن و کربن مونواکسید خالص و مخلوط آنها جهت کاربردهای عملی و مهندسی به صورت تابعی از دما ارائه شده است.

کلمات کلیدی: هیدروژن، کربن مونوکسید، گاز سنتز، نظریه چپمن-انسکوگ، خواص انتقالی، ضریب دوم ویریال

مقدمه

فرآیندهای شیمیایی، مانند فرآیند فیشر-تراپش^۱ و سوخت پاک در صنایع اتومبیل و نیروگاهی^۲ و^۳، به صورت فرآیندهای افزایش یافته است. از طرفی برای طراحی فرآیندهای شیمیایی در ابعاد صنعتی بر پایه این مواد نیاز به داشتن اطلاعات دقیق از خواص فیزیکوشیمیایی، به ویژه خواص ترمودینامیکی و ترموفیزیکی، آن ها در بازه وسیعی از دما و فشار است.

به دلیل افزایش تقاضای جهانی برای تولید سوخت های تمیزتر و تولید دسته وسیعی از محصولات پتروشیمیایی، تولید هیدروژن و گاز سنتز (مخلوط $CO + H_2$) به عنوان خوراک اولیه بسیاری از

*مسئول مکاتبات
آدرس الکترونیکیjaliliah@ripi.ir
شناسه دیجیتال: (DOI: 10.22078/pr.2025.5556.3468)

بازه دمایی بزرگ، از صفر مطلق تا ۳۰۰۰ کلوین، در حد چگالی صفر ارائه کردند. آنها یک پتانسیل جفت موثر را براساس روش وارونگی مستقیم به دست آوردند و برهم کنش بین مولکولی دو مولکول H_2 را با استفاده از یک تابع پتانسیل سه ضابطه ای مورس-چندجمله ای-وندروالس (MSV) مدل سازی کردند [۱۹]. این پتانسیل MSV به همراه نظریه رین واتر-فرند [۲۰-۲۲] برای محاسبه ویسکوزیته هیدروژن گازی در چگالی متوسط مورد استفاده قرار گرفت. تعدادی سطوح انرژی پتانسیل کوانتمی برای دایمر $(H_2)_2$ نیز تاکنون گزارش شده است [۲۳-۲۶]. همچنین، برای دایمر $(CO)_2$ برخی سطوح انرژی پتانسیل کوانتمی گزارش شده است که عمدتاً سهم های الکترواستاتیک، القایی و پراکندگی [۲۷] و [۲۸] و همچنین اثرات همبستگی مرتبه بالا [۲۹] را در برهم کنش دو مولکول CO با یکدیگر لحاظ می کنند. هک و دیکینسون [۳۰] با استفاده از پتانسیل کوانتمی ون درپیل و همکاران [۲۷]، به همراه مسیر کلاسیکی روتور صلب و نظریه جنبشی، خواص انتقالی CO در بازه دمایی ۷۷-۱۵۰۰ K را محاسبه نمودند. برای کمپلکس H_2CO در تعدادی از مطالعات از سطوح انرژی پتانسیل بین مولکولی برای تخمین سطح مقاطع برخورد H_2CO و ضرایب سرعت در محاسبات طیف سنجی استفاده شده است [۳۱ و ۳۲]. شینکه و همکاران [۳۳] با استفاده از روش کوانتمی میدان خودسازگار هارتری-فوک و همچنین داده های پراکندگی پرتوهای مولکولی متقاطع قسمت های دافعه و جاذبه پتانسیل بین مولکولی برای برهم کنش H_2 با CO را محاسبه کردند. جانکوسکی و زالویچ [۳۴] یک پتانسیل بین مولکولی کوانتمی محاسبه شده توسط نظریه اغتشاش سازگار با تقارن^۳ را برای برهم کنش H_2 با CO گزارش کردند.

به همین دلیل در این کار پژوهشی بر آن شدیم تا با استفاده از نظریه جنبشی گازها برخی خواص ترمودینامیکی گازهای خالص H_2 و CO و مخلوط CO H_2^+ را محاسبه و با داده های تجربی مقایسه نماییم. براساس حل چپمن-انسکوگ^۱ رابطه انتگرودیفرانسیلی بولتزمن با داشتن پتانسیل بین مولکولی می توان خواص انتقالی گازهای خالص و مخلوط را در فشارهای پایین محاسبه کرد. بر طبق نظریه چپمن-انسکوگ خواص انتقالی گازهای رقیق از طریق انتگرال های برخورد و با استفاده از پتانسیل های برهم کنش جفت مولکول محاسبه می شوند. روش های مختلفی برای محاسبه پتانسیل بین مولکولی با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتومی، داده های تجربی طیف سنجی و همچنین داده های تجربی خواص ترموفیزیکی توسعه یافته است. یکی از این روش ها، که توسط اسمیت و همکارانش توسعه داده شده است، روش وارونی^۲ مستقیم داده های تجربی ویسکوزیته [۴-۹] یا ضریب دوم ویرال [۵، ۷، ۱۰-۱۳] است. براین اساس یک رابطه همبستگی برای ویسکوزیته و هدایت گرمایی هیدروژن نرمال در چگالی کم توسط اسائل و همکاران، براساس نظریه جنبشی نیمه کلاسیک گازها، گزارش شده است [۱۴]. به روشی مشابه، یک همبستگی برای ضرایب انتقالی گازهای چند اتمی ساده در چگالی کم، از جمله CO، در بازه دمایی ۱۰۰-۳۰۰۰ K توسط بوشهری و همکاران ارائه شد [۱۵]. بزوووسکی و همکاران [۱۶] این رویکرد را برای همبستگی خواص انتقالی مخلوط های گازی متشکل از گازهای چند اتمی ساده، از جمله CO و گازهای نادر، در چگالی کم گسترش دادند. رابطه همبستگی آنها توسط مقدسی و همکاران برای تخمین تابع انرژی پتانسیل و برخی از خواص انتقالی مخلوط های دوتایی حاوی کربن دی اکسید در کنار He، Ne، Ar، Kr و Xe در بازه وسیعی از دما و فشار استفاده شد [۱۷]. مقاری و همکاران [۱۸] یک رابطه همبستگی تجربی برای انتگرال های برخورد ویسکوزیته هیدروژن در

1. Chapman-Enskog Theory

2. Inversion

3. SAPT

این تقسیم‌بندی ۱ روش مورد استفاده برای اندازه گیری داده‌های تجربی، (۲) میزان اعتبار گزارش دهندگان آن داده و ۳ تاریخ گزارش داده تجربی است. به صورت خلاصه می‌توان گفت که روش‌های نوین اندازه‌گیری داده‌های تجربی از دقت بیشتری نسبت به روش‌های قدیمی‌تر برخوردار هستند. همچنین برخی گروه‌های تحقیقاتی سابقه و تجربه بالایی در زمینه اندازه‌گیری خواص ترموفیزیکی گازها دارند و لذا داده‌های گزارش شده توسط آن‌ها از اعتبار بیشتری برخوردار است. به این ترتیب تنها داده‌های دسته اول برای به دست آوردن پارامترهای رابطه همبستگی مورد استفاده قرار گرفت تا رابطه همبستگی از صحت بالایی برخوردار باشد.

رابطه همبستگی برای انتگرال‌های برخورد

در این مرحله از کار تلاش شد تا یک رابطه همبستگی با استفاده از داده‌های ویسکوزیته در حد چگالی‌های کم و براساس نظریه چپمن-انسکوگ به دست آید. در منابع علمی مدل‌های تجربی متفاوتی استفاده شده است. یکی از روابطی که کاربرد زیادی پیدا کرده رابطه‌ای است که توسط مقاری و به‌نژاد [۱۸] در استخراج پتانسیل بین مولکولی گاز H_2 مورد استفاده قرار گرفته است. در این پژوهش نیز از تابع سه ضابطه‌ای فوق‌الذکر برای برازش و محاسبه انتگرال‌های برخورد مربوط به ویسکوزیته $(\Omega^{(2,2)*})$ به صورت تابعی از دمای کاهش یافته استفاده شد. به این منظور باید پارامترهای فاصله $(r^* = r/\sigma_{ij})$ و انرژی (ε/k) به صورت کاهش یافته برای هر یک از گازهای خالص هیدروژن و

هدف اصلی این کار پژوهشی محاسبه پتانسیل بین مولکولی برای $CO-CO$ ، H_2-H_2 و H_2-CO و استفاده از آن برای پیش‌بینی برخی دیگر از خواص تعادلی و غیرتعادلی گازهای خالص و مخلوط هیدروژن-کربن مونوکسید است. مسیر کلی کار، جمع‌آوری داده‌های تجربی از منابع معتبر، به دست آوردن یک رابطه همبستگی بین این داده‌ها براساس نظریه چپمن-انسکوگ، استفاده از این رابطه همبستگی در روند وارونی مستقیم برای تخمین تابع پتانسیل بین مولکولی و در نهایت محاسبه برخی خواص انتقالی و تعادلی، مانند ویسکوزیته، ضریب نفوذ و ضریب دوم ویریال با استفاده از مدل پتانسیل به دست آمده و ارزیابی دقت و کارایی آن است. چنین رویکردی تاکنون برای گاز سنتز در هیچ‌یک از مراجع قابل دسترس گزارش نشده است.

جمع‌آوری و دسته‌بندی داده‌های تجربی

در مرحله اول این کار داده‌های تجربی ویسکوزیته در حد چگالی صفر (η^0) ، ضریب نفوذ در حد چگالی صفر (D^0) و ضریب دوم ویریال (B) برای H_2 ، CO و مخلوط $CO+H_2$ از منابع مختلف و معتبر جمع‌آوری شده است. **جدول ۱** پ نشان‌دهنده تعداد این داده‌ها، محدوده دما و مرجع مورد استفاده برای داده مد نظر است. بررسی داده‌ها نشان داد که برخی از داده‌های گزارش شده در منابع دارای خطای نسبتاً زیادی هستند؛ به همین دلیل داده‌های جمع‌آوری شده به دو دسته تقسیم شدند. داده‌های با صحت بیشتر در دسته اول 1 (pd) و داده‌های با صحت کمتر در دسته دوم 2 (sd) قرار گرفتند. مبنای

جدول ۱ پارامترهای فاصله و انرژی برای مخلوط گازی H_2-CO و حالت‌های خالص آن

H_2-H_2	$CO-CO$	H_2-CO	پارامترهای انرژی و فاصله مولکول‌های همسان و غیر همسان
۲۹/۶۲	۱۰۹/۵۶	۵۸/۳۶	ε/k_B (K)
۲/۹۸۳	۳/۵۹۱	۳/۳۳۳	σ ($10^{-10}m$)

شکل نهایی تابع هم‌بستگی محاسبه شده به صورت زیر است.

$$\langle \Omega^{(2,2)*} \rangle = -0.045915 + 7.71314(T^*)^{-1/3} - 51.332871(T^*)^{1/3} + 76.03337(T^*)^{2/3} + 0.2226576(T^*) - 61.9997(T^*)^{4/3} \quad 0.3 \leq T^* \leq 1.2$$

$$+ 30.9128998(T^*)^{5/3}$$

$$\langle \Omega^{(2,2)*} \rangle = \exp[0.482685 - 0.628188(\ln T^*) + 0.276097(\ln T^*)^2 - 0.0715164(\ln T^*)^3 + 0.006766(\ln T^*)^4] \quad 1.2 \leq T^* \leq 10$$

$$\langle \Omega^{(2,2)*} \rangle = -0.0076098 + 3.0790275(\ln T^*)^{-1} - 2.6412642(\ln T^*)^{-2} - 0.0008001(\ln T^*)^{-3} - 0.0001171(\ln T^*)^{-4} \quad 10 \leq T^* \leq 100$$

(۵)

همچنین مقادیر پارامترهای مولکولی به دست آمده در جدول ۱ ذکر شده‌اند.

محاسبه پتانسیل بین مولکولی به روش وارونی مستقیم

وارونی مستقیم داده‌های تجربی ویسکوزیته که توسط اسمیت و همکارانش [۴-۱۳] توسعه داده شده است می‌تواند روشی برای تخمین پتانسیل بین مولکولی باشد. با این حال نشان داده شده است که نتایج حاصل از این روش اغلب برای $r^* \leq 1/3$ معتبر است [۷]. به همین دلیل برای ناحیه‌های دوربرد پتانسیل می‌توان از وارونی داده‌های ضریب دوم ویریل استفاده کرد [۷]. در ادامه به بررسی روش به کار رفته برای تخمین پتانسیل بین مولکولی در ناحیه‌های کوتاه‌برد و بلندبرد می‌پردازیم.

محاسبه بُرد کوتاه پتانسیل با وارونی داده‌های ویسکوزیته

روش وارونی مستقیم اسمیت و همکاران [۴-۱۳] براین اساس بنا نهاده شده است که در آن یک داده ترمودینامیکی را می‌توان به نقطه‌ای در نمودار انرژی پتانسیل بین مولکولی نسبت داد. این روش برای ویسکوزیته بر این مبنا است که یک داده انتگرال برخورد کاهش یافته $\langle \Omega^{(2,2)*} \rangle$ در یک دمای کاهش یافته (T^*) تنها به وسیله محدوده بسیار

مونو اکسید کربن و همچنین مخلوط آنها به طریقی تخمین زده شود. الگوریتم عمل به صورت زیر است: داده‌های ویسکوزیته گازهای خالص هیدروژن و مونو اکسید کربن و مخلوط آنها و حدس اولیه پارامترهای فاصله (σ) و انرژی (ϵ) برای هر یک از گازهای خالص هیدروژن و مونو اکسید کربن و مخلوط آنها به عنوان ورودی در نظر گرفته شدند. لازم به ذکر است که در این مرحله به عنوان حدس اولیه پارامترهای فاصله و انرژی برای گازهای خالص هیدروژن و مونو اکسید کربن که به ترتیب در منابع [۱۵، ۳۵] ذکر شده‌اند استفاده شده است. برای مخلوط گازی نیز از قاعده ترکیبی لورنتز- برتوله طبق روابط ۱ و ۲ استفاده شد.

$$\epsilon_{ij} = (\epsilon_{ii} \epsilon_{jj})^{1/2} \quad (۱)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_{ii} + \sigma_{jj}) \quad (۲)$$

لازم به ذکر است که نوع قاعده ترکیبی مورد استفاده اصولاً تاثیر چندانی در نتایج نهایی ندارد؛ چرا که در مراحل بعدی تمام این مقادیر تغییر یافته و به عبارتی بهینه خواهند شد. در مرحله ۲ براساس داده‌های ورودی پارامترهای رابطه هم- بستگی بهینه شدند. برای انجام این کار از الگوریتم لونبرگ-مارکوات^۱ استفاده شده است. محاسبه براساس کمینه کردن تابع هدف^۲ (of) زیر و با تغییر دادن پارامترهای رابطه هم‌بستگی انجام گرفت:

$$of = \sum_i \left(\frac{\eta_i^{\exp} - \eta_i^{\text{cal}}}{\eta_i^{\text{cal}}} \right)^2 \quad (۳)$$

در ادامه براساس حدس‌های اولیه و نتایج حاصل از مرحله قبلی پارامترهای فاصله و انرژی به ترتیب برای گازهای خالص و مخلوط آنها و سپس ضرایب دیگر رابطه هم‌بستگی محاسبه شد. محاسبه براساس کمینه کردن تابع هدف رابطه ۳ و با تغییر دادن پارامترهای فاصله و انرژی انجام گرفت. برای ارزیابی میزان دقت محاسبات از تابع خطای رابطه ۴ استفاده شد.

$$\text{DEV}\% = \frac{\eta_i^{\exp} - \eta_i^{\text{cal}}}{\eta_i^{\text{cal}}} \cdot 100 \quad (۴)$$

1. Levenburg-Marquardt

2. Objective Function

$$AAD\% = \frac{1}{n} \sum_i (DEV\%)_i \quad (9)$$

این فرآیند تا زمانی ادامه پیدا کرد که $AAD\%$ (میانگین خطای مطلق نسبی) به کمترین مقدار خود برسد. محاسبات نشان داد که با سه بار تکرار این فرآیند بهترین نتایج به دست می آیند.

استفاده از ضرایب دوم و بیرال برای محاسبه عرض چاه پتانسیل و ناحیه دوربرد آن

همان گونه که گفته شد نتایج حاصل از وارونی مستقیم داده های ویسکوزیته عمدتاً برای $r^* \leq 1.3$ معتبر است. با این حال می توان عرض چاه پتانسیل را با استفاده از وارونی داده های تجربی ویسکوزیته به دست آورد. به این منظور از روش توسعه یافته در منبع [۷] استفاده شده است. در این روش با داشتن داده های قسمت داخلی چاه پتانسیل (r_L) و با استفاده از روابط زیر می توان قسمت بیرونی چاه پتانسیل (r_L) را محاسبه کرد.

$$U^* = T^* - 1 \quad (10)$$

$$r_R^{*3} - r_L^{*3} = -\frac{2\pi}{3} N_0 (B^* - 1) N(T^*) \quad (11)$$

در این رابطه تابعی از دمای کاهش یافته است که مقادیر عددی آن در منبع [۷] ذکر شده است. در این کار پژوهشی داده های تجربی ضریب دوم و بیرال مخلوط H_2 -CO برای محاسبه دیواره بیرونی چاه پتانسیل مورد استفاده قرار گرفت. در نهایت با استفاده از روش ذکر شده در بالا مقادیر عددی دیواره بیرونی چاه پتانسیل محاسبه گردید و برای برآزش داده ها در قسمت بعد مورد استفاده قرار گرفت. لازم به ذکر است که به واسطه اندک بودن تعداد داده های تجربی ضریب دوم و بیرال برای مخلوط H_2 -CO (تعداد ۵ داده تجربی) از رابطه همبستگی دیاموند و همکاران [۳۹]، که توسط رابطه ۱۲ نشان داده شده است، برای تخمین تعداد ۳۰ داده ضریب دوم و بیرال در بازه دمایی K ۱۲۵-۲۷۰ استفاده شد.

(۱۲)

$$B_{12} = 44.409 - \frac{9.8417 \times 10^3}{T} + \frac{1.7911 \times 10^5}{T^2} - \frac{7.7626 \times 10^6}{T^3}$$

کوتاهی از فاصله در نمودار پتانسیل بین مولکولی و حول فاصله r تعیین می شوند. در نتیجه می توان یک جفت داده تجربی (η, T) را به یک جفت داده در نمودار پتانسیل $U(r)$ تبدیل کرد. به این منظور از روابط زیر استفاده می شود:

$$r^* = \sqrt{\Omega^{(2,2)*}} \quad (6)$$

$$U_n^*(r^*) = G_n^*(T^*) T^* \quad (7)$$

در این روابط $G_n^*(T^*)$ تابع وارونگی مرتبه n ام، $r^* \equiv r/\sigma$ و $U^* \equiv U/\varepsilon$ می باشند. همچنین σ و ε به ترتیب پارامترهای فاصله و انرژی تعریف شده در قسمت های قبل هستند. این روابط، روابط اصلی در این روش وارونی هستند. در این روش G_0^* که نشان دهنده اولین تابع تکرار است با استفاده از یک مدل پتانسیل اولیه ($U_0(r)$) آغاز می شود. یک انتخاب مناسب می تواند مدل پتانسیل لندارد-جونز (۱۲/۶) باشد. داده های $\Omega^{(2,2)*}(T^*)$ برای این تابع پتانسیل به وسیله وایلند و همکارانش [۳۶] ذکر شده است. براین اساس می توان مقادیر U_0^* را از روی این داده ها محاسبه کرد. با داشتن مقادیر $\Omega^{(2,2)*}(T^*)$ از رابطه ۶ از یک طرف و مقادیر تابع G^* محاسبه شده از روی مدل پتانسیل اولیه از طرف دیگر می توان جفت داده تجربی $(\Omega^{(2,2)*}, T^*)$ را به یک جفت داده در نمودار پتانسیل یعنی (U^*, r^*) تبدیل کرد و با تکرار این فرآیند می توان به تقریب مناسب تری از نمودار انرژی پتانسیل دست یافت. در واقع پتانسیل به دست آمده جدید تقریب نزدیک تری به مقدار واقعی در روی نمودار پتانسیل است. از روی مقادیر پتانسیل محاسبه شده در هر مرحله می توان مقادیر $\Omega^{(2,2)*}$ را با حل عددی انتگرال های برخورد محاسبه کرد. به این منظور از برنامه کامپیوتری نوشته شده توسط اوهارا و اسمیت [۳۷ و ۳۸] استفاده شده است. در هر مرحله تفاوت بین مقادیر محاسبه شده انتگرال های برخورد $(\Omega_{cal}^{(2,2)*})$ و مقادیر تجربی حاصل از رابطه ۵ $(\Omega_{exp}^{(2,2)*})$ به وسیله روابط

$$DEV\% = 100 \cdot \frac{|\Omega_{cal,i}^{(2,2)*} - \Omega_{exp,i}^{(2,2)*}|}{\Omega_{exp,i}^{(2,2)*}} \quad (8)$$

زیر محاسبه شد:

برازش داده‌ها و ارائه مدل تابع پتانسیل

در این قسمت از تحقیق لازم است تا مقادیر عددی پتانسیل محاسبه شده در قسمت قبل توسط یک تابع پتانسیل مناسب مدل شود. توابع تجربی زیادی برای برازش داده‌های پتانسیل توسط محققین متفاوتی به کار رفته است. از جمله توابع مورد استفاده که در منابع بسیار کاربرد داشته است تابع سه ضابطه‌ای زیر است:

$$U^*(r^*) = \begin{cases} \exp(2\beta(1-\gamma r^*)) - 2\exp(\beta(1-\gamma r^*)) & r^* \leq r_1^* \\ a_1 + (r^* - r_1^*) \{ a_2 + (r^* - r_2^*) [a_3 + (r^* - r_1^*) a_4] \} & r_1^* \leq r^* \leq r_2^* \\ -\frac{C_6^*}{r^{*6}} & r_2^* \leq r^* \leq \infty \end{cases} \quad (۱۳)$$

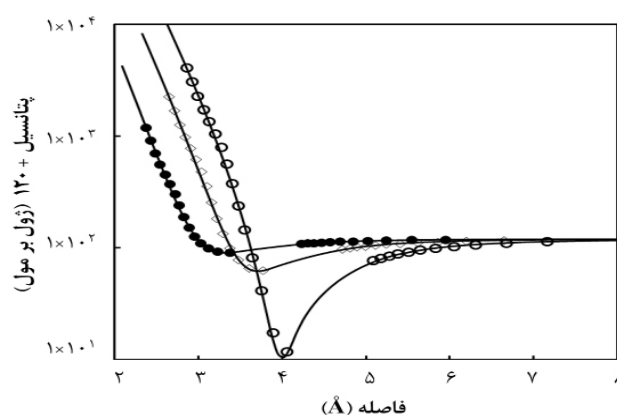
این تابع سه ضابطه‌ای از یک تابع مورس^۱ برای پتانسیل‌های کوتاه برد ($r^* \leq r_1^*$)، واندروالس^۲ برای پتانسیل‌های دوربرد ($r_2^* \leq r^* \leq \infty$) و یک تابع قطعه چندجمله‌ای^۳ برای وصل کردن این دو تابع به هم (و در بازه $r_1^* \leq r^* \leq r_2^*$) تشکیل شده است و به همین دلیل با نام MSV شناخته می‌شود [۱۹].

نتایج و بحث

براساس نتایج به دست آمده در قسمت‌های قبل و با استفاده از تابع پتانسیل محاسبه شده برای سیستم مورد مطالعه می‌توان خواص انتقالی (شامل ویسکوزیته، ضریب نفوذ، نفوذ پذیری گرمایی، ...) را محاسبه کرد. برای محاسبه خواص مذکور با استفاده از روش‌های نظریه برخورد نیاز به محاسبه انتگرال‌های برخورد ($\Omega^{(l,s)*}$) مربوطه داریم.

جدول ۲ پارامترهای پتانسیل MSV کاهش یافته رابطه ۱۲ برای مخلوط گازی H₂-CO و حالت خالص آنها

δ	γ	a_1	a_2	a_3	a_4	C_6^*	r_1^*	r_2^*
۶/۸۶۳۹	۰/۸۹۷۷	-۰/۹۴۷۴	۱/۹۷۷۶	-۰/۶۵۷۴	-۰/۹۳۶۶	۳/۳۴۹۱	۱/۱۵۶۳	۱/۴۶۱۷



شکل ۱ مقایسه مقادیر پتانسیل حاصل از وارونی داده‌های تجربی (نمادها) و مقادیر حاصل از برازش (—) توسط رابطه MSV برای: (◊) H₂-CO و (○) H₂-H₂ (●) CO-CO

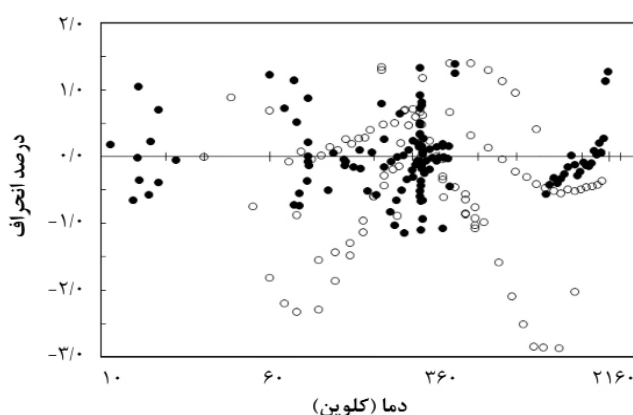
1. Morse
2. Van der Waals
3. Spline

رابطه همبستگی ۵ از توانایی بسیار خوبی در محاسبه ویسکوزیته برای گاز H_2 و CO خالص و مخلوط آنها برخوردار است. همچنین در این کار نتایج حاصل از محاسبات با استفاده از رابطه همبستگی ۵ با سه روش متداول در محاسبه ویسکوزیته که بیشتر در مهندسی کاربرد داشته و عمدتاً بر پایه نظریه حالت‌های متناظر بنا نهاده شده‌اند نیز استفاده شده است. این روش‌ها با عنوان‌های روش لوکاس [۴۱]، روش چانگ [۴۲ و ۴۳] و روش سوپرترپ [۴۴] است. محاسبات مربوط به دو روش اول با استفاده از جزئیات ذکر شده توسط پولینگ و دیگران [۳۵] و با برنامه‌نویسی در محیط مت کد^۱ انجام گرفت.

در این کار پژوهشی با استفاده از برنامه وایلند و همکارانش [۴۰] و با استفاده از تابع پتانسیل به‌دست آمده انجام گرفت و برای محاسبه خواص انتقالی مورد استفاده قرار گرفت که در ادامه ارائه شده است.

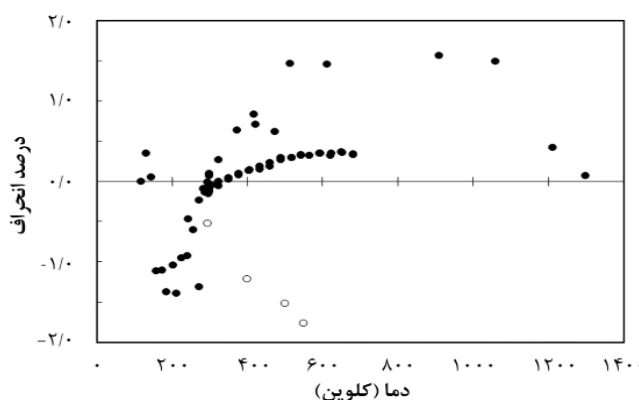
محاسبه ویسکوزیته با استفاده از رابطه هم بستگی

در این قسمت مقادیر ویسکوزیته با استفاده از رابطه ۵ و رابطه حاصل از نظریه انسکوگ-چپمن میان انتگرال برخورد و ضریب ویسکوزیته گازهای رقیق (روابط پ ۵ تا پ ۸ پیوست) محاسبه و با مقادیر تجربی مقایسه شده است. شکل‌های ۲ تا ۴ نشان‌دهنده اختلاف بین مقادیر تجربی و محاسباتی است. همان‌گونه که این نمودارها نشان می‌دهند



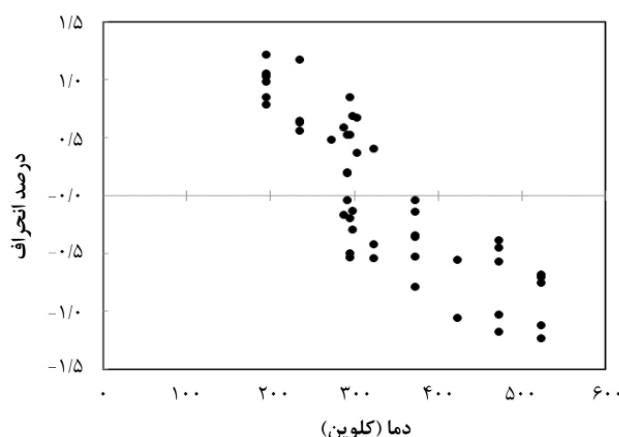
شکل ۲ نمودار درصد انحراف بین ویسکوزیته محاسبه شده در ناحیه چگالی‌های کم توسط رابطه همبستگی و مقادیر تجربی برای گاز خالص H_2 . نتایج برای داده‌های دسته اول pd (●) [مراجع ۱-۱۸ پیوست] و دسته دوم sd (○) [مراجع ۱۹-۲۴ پیوست]

$$DEV\% = 100 \cdot \frac{\eta_{exp} - \eta_{cal}}{\eta_{cal}}$$



شکل ۳ نمودار درصد انحراف بین ویسکوزیته محاسبه شده توسط رابطه همبستگی و مقادیر تجربی برای گاز خالص CO . نتایج برای داده‌های دسته اول pd (●) [مراجع ۲۳ و ۲۷-۳۱ پیوست] و دسته دوم sd (○) [مراجع ۳۲ پیوست]

$$DEV\% = 100 \cdot \frac{\eta_{exp} - \eta_{cal}}{\eta_{cal}}$$



شکل ۴ نمودار درصد انحراف بین ویسکوزیته محاسبه شده توسط رابطه همبستگی و مقادیر تجربی برای مخلوط H₂-CO

$$DEV\% = 100 \cdot \frac{\eta_{exp} - \eta_{cal}}{\eta_{cal}} \quad [\text{مراجع ۲۳ و ۳۶ پیوست}]$$

می شود که نتایج حاصل از محاسبه ویسکوزیته با استفاده از رابطه همبستگی ۵ بسیار بهتر از سایر روش ها است. همچنین این نتایج نشان می دهد که روش لوکاس [۴۱] نتایج قابل قبول تری نسبت به دو روش دیگر ارائه می دهد.

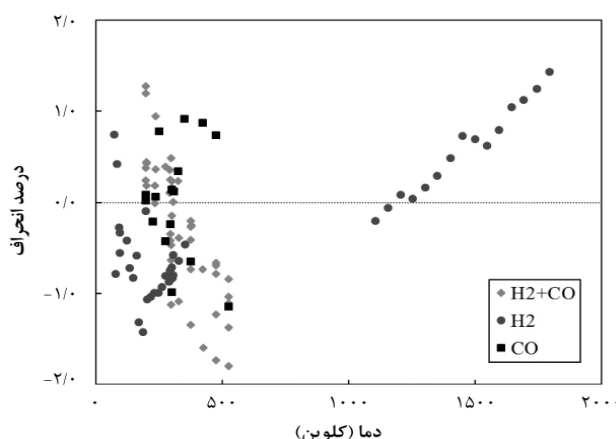
محاسبه ویسکوزیته با استفاده از پتانسیل MSV

شکل ۵ تفاوت نسبی مقادیر محاسبه شده با استفاده از پتانسیل به دست آمده در این کار و مقادیر تجربی را نشان می دهد.

به دلیل طولانی بودن روابط مورد استفاده از ذکر کردن آنها در این قسمت صرف نظر می شود. همچنین محاسبات مربوط به روش سوپرترپ توسط نرم افزار NIST4، که توسط موسسه استاندارد و تکنولوژی آمریکا^۱ تهیه شده است، انجام گرفت. نتایج حاصل از محاسبات انجام گرفته با استفاده از رابطه همبستگی ارائه شده در این کار همراه با نتایج حاصل از این سه روش در جدول ۳ خلاصه شده اند. از نتایج گزارش شده در این جدول مشخص

جدول ۳ مقایسه نتایج حاصل از محاسبه ویسکوزیته با استفاده از روش های متفاوت به کار رفته برای گازهای H₂، CO و مخلوط آنها در فشارهای کم

سوپرترپ [۴۴]	لوکاس [۴۱]	چانگ [۴۲ و ۴۳]	کار حاضر (رابطه ۵)
H ₂			
۲/۲	۲/۹	۱۲	۰/۳۸
۱۴	۲۳/۵	۱۷/۸	۱/۳۸
CO			
۱/۵	۲/۵	۴/۵	۰/۴۷
۲/۸	۳/۷	۵/۵	۱/۵۶
H ₂ - CO			
۸/۳	۳/۲	۱۰/۴	۰/۶۷
۱۷	۷/۱	۱۸/۱	۱/۲۳



شکل ۵ نمودار درصد انحراف (%DEV) مقادیر محاسبه شده با پتانسیل MSV از مقادیر تجربی ویسکوزیته برای گاز H_2 خالص (●) [مراجع ۱۸-۱ پیوست]، گاز CO خالص (■) [مراجع ۲۳ و ۲۷-۳۱ پیوست] و مخلوط این دو (♦) [مراجع ۲۳ و ۳۶ پیوست]. به صورت تابعی از دما (T) $DEV\% = 100 \cdot \frac{\eta_{exp} - \eta_{cal}}{\eta_{cal}}$

محاسبه ضرایب نفوذ با استفاده از پتانسیل MSV

نتایج حاصل از محاسبات ضرایب نفوذ با استفاده از مدل پتانسیل MSV در جدول ۵ خلاصه شده است. همچنین شکل ۶ داده‌های محاسبه شده را با مقادیر تجربی مقایسه کرده است. بررسی نتایج حاصل نشان می‌دهد که خطای حاصل از محاسبات در حد خطای تجربی بوده و در نتیجه پتانسیل MSV به‌خوبی توانایی محاسبه ضرایب نفوذ را دارد.

محاسبه ضرایب دوم ویرال

براساس روش‌های ترمودینامیک کلاسیک می‌توان رابطه حالت یک گاز غیر ایده‌آل را به صورت تابعی از حجم یا فشار بسط داد. چنین بسطی را تحت عنوان بسط ویرال می‌شناسیم. بر این اساس رابطه حالت ویرال یک گاز را می‌توان به صورت زیر نوشت [۵۰]:

$$\frac{pV}{nRT} = Z = 1 + B(T)\frac{n}{V} + C(T)\frac{n^2}{V^2} + \dots \quad (14)$$

که در این رابطه $B(T)$ و $C(T)$ به ترتیب ضرایب دوم و سوم ویرال هستند. برای یک مخلوط v جزئی از گازها می‌توان نشان داد که ضریب دوم ویرال به صورت زیر با کسر مولی (x) رابطه دارد:

$$B_{mix} = \sum_{i=1}^v \sum_{j=1}^v x_i x_j B_{ij} \quad (15)$$

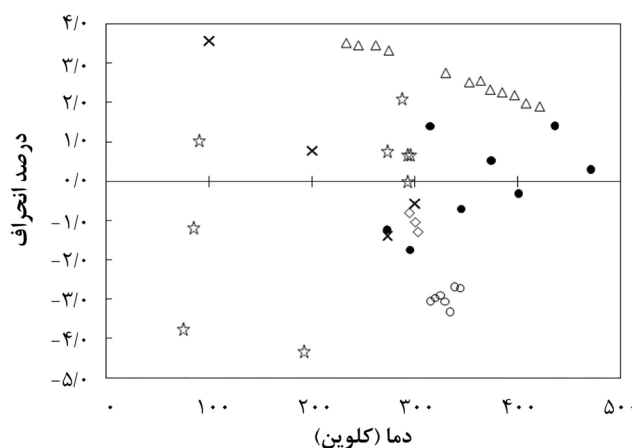
نتایج حاصل نشان داد که در محدوده دماهای کمتر از ۷۰ K روش به کار رفته در این کار با خطای بالایی مواجه می‌شود. خطاهای کمتر از ۷۰ K برای گاز H_2 مشاهده می‌شود به این دلیل است که این گاز یک گاز کوانتومی بوده و در دماهای کمتر از این محدوده آثار کوانتومی کاملاً مشهود است. ولی روش‌های به کار رفته برای محاسبه انتگرال‌های برخورد در این کار کاملاً بر مبنای فیزیک کلاسیک و بدون در نظر گرفتن آثار کوانتومی است. به نظر می‌رسد برای بهبود کیفیت محاسبات نیاز به وارد کردن تصحیحات کوانتومی در دماهای کمتر از ۷۰ K داریم. اما در این مرحله از کار پژوهشی از این تصحیحات چشم پوشی کرده و محاسبات کاملاً به صورت کلاسیکی و در محدوده دماهای بیشتر از ۷۰ K انجام پذیرفت. همچنین در دماهای بالاتر از ۲۰۰۰ خطای محاسبات بالاتر از محدوده قابل قبول است. همین حالت در محاسبات انجام گرفته توسط مقاری و به‌نژاد [۱۸] قابل مشاهده است. به هر حال با توجه به این میزان خطا تصمیم گرفته شد تا محاسبات مربوطه در محدوده ۷۰-۲۰۰۰ K انجام گیرد. با محدود کردن داده‌ها در این بازه نتایج بسیار بهتری حاصل شد که در جدول ۴ خلاصه شده‌اند.

جدول ۴ نتایج حاصل از محاسبه ویسکوزیته در بازه دمایی ۰۰۰۲-۰۷ K توسط پتانسیل VSM

سیستم	H ₂	CO	H ₂ -CO
میانگین درصد انحراف نسبی (%AAD)	۰/۷۲	۰/۴۸	۰/۶۳
بیشینه درصد انحراف نسبی (%MAD)	۲/۱۷	۱/۱۴	۱/۸۰

جدول ۵ نتایج حاصل از محاسبه ضرایب نفوذ در بازه دمایی T= ۷۰-۱۱۰۰ K توسط پتانسیل MSV

system	H ₂ -CO	H ₂	CO
%AAD	۱/۰۰	۰/۸۶	۱/۵۹
%MAD	۲/۲۰	۱/۸۸	۵/۹۹



شکل ۶ درصد انحراف (%DEV) مقادیر محاسبه شده از پتانسیل MSV با مقادیر تجربی ضرایب نفوذ به صورت تابعی از دما. (◇) گاز H₂ خالص [۴۵]؛ (Δ) CO خالص [۴۶]؛ مخلوط H₂-CO مستخرج از [۴۷] (●)؛ [۴۸] (○)؛ [۴۹] (×)؛ [۴۵] (☆)؛ [۴۸] (☆)

$$\text{DEV}\% = 100 \cdot \frac{D_{\text{exp}} - D_{\text{cal}}}{D_{\text{cal}}}$$

که در آن B_{ij} پارامتری است که وابسته به پتانسیل بین مولکولی بوده و براساس روش‌های مکانیک آماری می‌توان آن را محاسبه کرد. ضریب دوم ویریل با فرض اینکه برهم‌کنش میان مولکول‌های گاز کروی و غیر قطبی است چنین می‌باشد [۵۱]:

$$B_{ij} = -2\pi N_A \int_0^\infty \left[e^{-\beta U(r_{ij})} - 1 \right] r_{ij}^2 dr_{ij} \quad (16)$$

که در این رابطه k_B ، $\beta = 1/k_B T$ ، ثابت بولتزمن، NA عدد آووگادرو و $U(r_{ij})$ پتانسیل بین مولکولی به صورت تابعی از پارامتر فاصله (r_{ij}) می‌باشد. به راحتی می‌توان نشان داد که این رابطه براساس پارامترهای فاصله و انرژی کاهش یافته $(r^* = r/\sigma)$ و به صورت زیر در می‌آید:

$$U = U_0 + U_{n,s} \quad (18)$$

که در این رابطه U_0 قسمت کروی و $U_{n,s}$ قسمت غیر کروی پتانسیل است. در این صورت با در نظر گرفتن گشتاورهای 2ⁿ قطبی (دوقطبی، چهارقطبی،

پارامترهای مولکولی شامل گشتاور دو قطبی (μ)، گشتاور چهار قطبی (χ)، قطبش پذیری دو قطبی (a)، ناهمسان گردی قطبش (K) و ضریب پراکندگی (C_6) و یک مدل پتانسیل مناسب است. با استفاده از این مدل پتانسیل می توان انتگرال های $J_k(T)$ را که به صورت زیر تعریف می شود محاسبه کرد.

$$J_k(T^*) = \frac{k-3}{2} \int_0^\infty \frac{dr^*}{(r^*)^{k-2}} \exp(-U_0^*/T^*) \quad (20)$$

که در این رابطه U_0^* قسمت کروی (غیر اختلالی) پتانسیل کاهش یافته و k یک ضریب حقیقی بین ۳۰-۶ است. با توجه به رابطه ۱۸ ضریب دوم ویرال را می توان به صورت زیر محاسبه کرد:

$$B_{ij}^{cal} = B_{ij}^{(0)} + B_{ij}^{n.s} \quad (21)$$

که در این رابطه $B_{ij}^{(0)}$ سهم کروی و $B_{ij}^{n.s}$ سهم غیر کروی ضریب دوم ویرال است. محاسبه $B_{ij}^{(0)}$ ساده تر بوده و با توجه به اینکه مدل پتانسیل MSV مورد استفاده در این کار یک تابع سه ضابطه ای است، می توان $B_{ij}^{(0)}$ را با به کارگیری رابطه (۱۷) به صورت مجموع سه انتگرال در سه بازه صفر تا r_1^* ، برای تابع مورس، r_1^* تا r_2^* ، برای تابع چند جمله ای، و r_2^* تا بی نهایت برای تابع واندروالس، محاسبه نمود. برای محاسبه $B_{ij}^{n.s}$ نیاز به محاسبه انتگرال های $J_k(T^*)$ است. برای محاسبه این انتگرال ها از رابطه پتانسیل مستخرج در این کار پژوهشی استفاده شده است. همچنین برخی پارامترهای مولکولی لازم که شکل کاهش یافته آنها به صورت زیر است از منابع مختلف جمع آوری شد و در **جدول ۶** ذکر گردیده است. لازم به ذکر است که با توجه به این که مقادیر پارامترهای شعاع (σ) و انرژی (ϵ) محاسبه شده برای مونواکسید کربن در این کار با مقادیر گزارش شده در منبع [۱۶] تفاوت کمی دارد مقادیر کاهش یافته مورد استفاده در این کار به مقدار بسیار کمی متفاوت از مقادیر مورد استفاده در این منبع است.

هشت قطبی و ... و اثرات غیر کروی پتانسیل می توان فرمول بندی لازم را به دست آورد. این کار اولین بار توسط پوپل [۵۲ و ۵۳] و با استفاده از بسط اختلال انجام گرفت. به این صورت که قسمت کروی پتانسیل (U_0) به صورت مختل نشده و قسمت غیر کروی آن (U_{ns}) به صورت اختلالی محاسبه شد. در این حالت، می توان ضریب دوم ویرال را به صورت زیر نوشت:

$$B(T) = B^{(0)}(T) + B^{(1)}(T) + B^{(2)}(T) + \dots \quad (19)$$

که در آن $B^{(0)}(T)$ قسمت مختل نشده ضریب دوم ویرال (حاصل از U_0) و $B^{(m)}(T)$ حاصل از اختلال مرتبه m تابع پتانسیل (حاصل از $U_0^{(m)}$) است. پوپل و باکینگهام [۵۲ و ۵۴] با مختل کردن مدل پتانسیل باکینگهام توانستند فرمول بندی لازم را به دست آورده و ضرایب ویرال برخی مولکول های قطبی را محاسبه کنند. نتایج محاسبات آنها با مقادیر تجربی توافق خوبی داشت. کیلیچ [۵۰ و ۵۵] با آنالیز تانسوری پتانسیل اختلالی و با در نظر گرفتن سهم دائمی گشتاورهای 2^n قطبی و سهم القایی آنها توانست فرمول بندی کاملی را به دست آورد. بوشهری و همکاران [۵۶] و مقاری و موسوی [۵۷] با استفاده از مدل های پتانسیل بسیار دقیقی که براساس روش های آغازین^۱ به دست آمده بودند تلاش کردند جدول بندی لازم برای محاسبه ضریب دوم ویرال را در بازه وسیعی از دما به دست آورند. با استفاده از جدول های توسعه یافته توسط این محققین [۵۶ و ۵۷] به راحتی و با دقت فراوانی می توان ضریب دوم ویرال را برای بسیاری از مولکول ها محاسبه کرد. روابط لازم برای محاسبه ضریب دوم ویرال با استفاده از این مدل به صورت کامل برای سیستم های تک جزئی توسط بوشهری و همکاران [۵۶] و برای سیستم های متشکل از مخلوط گازها توسط بوزوفسکی و همکارانش [۱۶] ارائه شده است و به دلیل طولانی بودن این روابط از تکرار آنها در اینجا صرف نظر می کنیم. برای محاسبه ضریب دوم ویرال با استفاده از این روابط نیاز به برخی

جدول ۶ مقادیر پارامترهای مورد نیاز برای محاسبه ضریب دوم ویرال

	μ^*	Θ^*	α^*	κ	C_6^*
H ₂	.	۰/۹۶ ^d	۰/۰۲۹۸۴ ^a	۰/۰۹۱۱۴ ^a	۲/۱۵۵۳۸ ^b
CO	۰/۱۵۹۰۴ ^c	۰/۸۹۵ ^d	۰/۰۴۱۰۶ ^c	۰/۱۶۸ ^c	۲/۶۳ ^c

Dipole moment	$\mu^* = \mu / (\epsilon \sigma^3)^{1/2}$	^a مقادیر $\alpha^* = 934$ و $\alpha^\perp = 718$ مستخرج از منبع [۵۸].
Quadrupole moment	$\Theta^* = \Theta / (\epsilon \sigma^5)^{1/2}$	^b مقدار $\bar{C}^{(6)} = 64990267054058$ مستخرج از منبع [۵۹].
Dipole polarizability	$\alpha^* = \bar{\alpha} / \sigma^3$	^c مقادیر کاهش یافته از منبع [۱۶] استخراج شد و با توجه به مقادیر σ و ϵ ارائه شده در این کار تغییر داده شد.
polarizability anisotropy	$\kappa = (1/3)(\alpha^\parallel - \alpha^\perp) / \sqrt{\bar{\alpha}}$	^d حاصل از برازش داده‌های تجربی ضریب دوم ویرال.
Dispersion coefficient	$C_6^* = \bar{C}^{(6)} / (\epsilon \sigma^6)$	

محاسبه شد. این مقادیر همراه با سایر خواص انتقالی محاسبه شده در این کار در **جدول (پ ۲)** گزارش شده‌اند. لازم به ذکر است که به دلیل عدم امکان دسترسی به مقادیر تجربی T_a محاسبات انجام گرفته قابل مقایسه با مقادیر تجربی نیست. به هر حال با توجه به نتایج به دست آمده برای سایر خواص انتقالی محاسبه شده انتظار داریم که این مقادیر نیز در بازه دمایی ذکر شده دارای دقت بالایی باشند و خطای محاسبات در حد خطای اندازه‌گیری باشد.

جدول‌بندی خواص انتقالی به صورت تابعی از دما

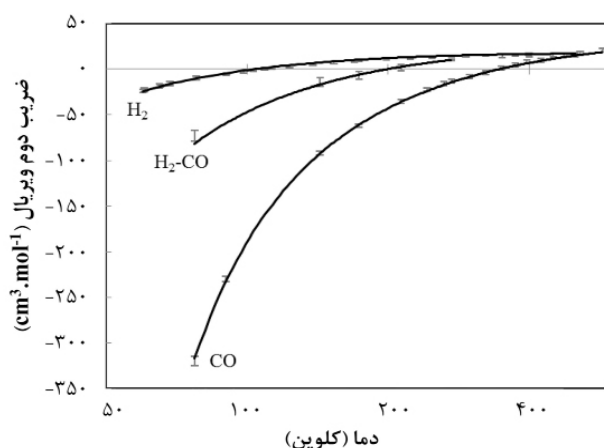
در این قسمت پس از اطمینان از صحت محاسبات بر آن شدیم تا خواص انتقالی ذکر شده در قسمت‌های بالا را به صورت تابعی از دما در محدوده ۷۰ K-۲۰۰۰ محاسبه و گزارش کنیم تا در صورت نیاز محققین مورد استفاده قرار گیرد. نتیجه محاسبات انجام گرفته در **جدول (پ ۳)** گزارش شده است. لازم به ذکر است در این جدول η_{12} و D_{12} برای مخلوط گازی دارای کسر مولی‌های برابر ($x_1 = x_2 = 0.5$) از هیدروژن (۱) و مونواکسید کربن (۲) به عنوان نمونه محاسبه شده‌اند. خواص فوق را به سادگی میتوان با استفاده از روابط ارائه شده در این مقاله برای غلظت‌های مختلف از هیدروژن و مونواکسید کربن محاسبه نمود.

همچنین مشابه با روش به کار رفته در [۵۰] مقادیر گشتاورهای چهار قطبی کاهش یافته (Θ^*) از برازش داده‌های تجربی به دست آمد که توافق بسیار خوبی با مقادیر گزارش شده در کارهای قبلی داشت. (مقادیر $\Theta^* = 0.95 \times 26 - 10^{e.s.u.}$ برای گشتاور چهار قطبی هیدروژن در منبع [۵۰] ذکر شده است که پس از کاهش دادن با توجه به مقادیر σ و ϵ حاصل در این کار مقدار $\Theta^* = 0.965$ حاصل می‌شود. همچنین مقدار 0.84 برای مونواکسید کربن در منبع [۱۶] ذکر شده است.) در نهایت انتگرال‌های $J_k(T^*)$ با استفاده از مدل پتانسیل ارائه شده در این کار به صورت عددی حل شد و برای محاسبه مقادیر ضریب دوم ویرال مورد استفاده گرفت. نتایج حاصل از محاسبات با مقادیر تجربی در **شکل ۷** مقایسه شده است. همان گونه که از این شکل مشخص است در هر سه مورد برای دماهای بالاتر از ۷۰ K خطای محاسبات در حد نایقینی مقادیر تجربی است. این امر نشان می‌دهد که رابطه پتانسیل به دست آمده به خوبی قادر است تا ضریب دوم ویرال را برای گازهای هیدروژن و مونواکسید کربن خالص و مخلوط آنها پیش‌بینی کند که دلیل دیگری بر صحت پتانسیل حاصل (البته برای دماهای بالاتر از ۷۰ K) است.

محاسبه ضرایب نفوذپذیری گرمایی (T_a) با استفاده از

مدل پتانسیل MSV

در این کار مقادیر T_a در بازه دمایی ۷۰ K-۲۰۰۰



شکل ۷ مقایسه مقادیر محاسبه شده ضریب دوم ویریل (خط پیوسته) با مقادیر تجربی همراه با عدم قطعیت آنها اخذ شده از منابع [۳۹ و ۴۰]. (محور افقی دارای مقیاس لگاریتمی است)

انجام آزمایشات زمان‌بر و هزینه‌بر، با صحت بسیار بالایی محاسبه نمود. مدل پتانسیل سه ضابطه‌ای MSV، علاوه بر برآزش بسیار خوب داده‌های پتانسیل بین مولکولی، قادر است خواص انتقالی و تعادلی گازهای خالص و مخلوط را با صحت به مراتب بالاتر از روابط تجربی و روش‌های مبتنی بر قانون حالات متناظر و روابط حالت محاسبه نماید. در این پژوهش نشان داده شد که رویکردهای حاصل از مکانیک آماری ابزار مناسبی برای محاسبه خواص انتقالی و تعادلی گازهای صنعتی فراهم می‌آورد.

پیوست

همچنین مقادیر محاسبه شده برای $\Omega^{(2,2)}$ و دیگر انتگرال‌های برخورد بدون بعد به صورت تابعی از دمای کاهش یافته در جدول (پ۳) گزارش شده است.

نتیجه‌گیری

روش وارونگی داده‌های تجربی ویسکوزیته و ضریب دوم ویریل گازهای رقیق یکی از رویکردهای مناسب برای به‌دست آوردن انرژی برهم‌کنش موثر سیستم‌های مولکولی کوچک، مانند مولکول‌های تک اتمی و دو اتمی همسان و غیرهمسان، می‌باشد. با استفاده از انرژی پتانسیل برهم‌کنش حاصل از روش وارونی و حل چپمن-انسکوگ رابطه بولتزمن می‌توان خواص ترموفیزیکی گازهای دواتمی خالص و مخلوط را در چگالی‌های پایین و در بازه دمایی گسترده، بدون

مراجع

- [1]. Anderson, R.B., Kolbel, H., Ralke, M., (1984). The Fischer-Tropsch Synthesis, 1st ed., Academic Press, Florida.
- [2]. Cormos, C.-C., Starr, F., Tzimas, E., Peteves, S., (2008). Innovative concepts for hydrogen production processes based on coal gasification with capture, International Journal of Hydrogen Energy, 33 (2008) 1286-1294. doi.org/10.1016/j.ijhydene.2007.12.048.
- [3]. Consonni, S., Viganò, F., (2005). Decarbonized hydrogen and electricity from natural gas, International Journal of Hydrogen Energy, 30 (2005) 701-718. doi.org/10.1016/j.ijhydene.2004.07.001.
- [4]. Boushehri, A., Viehland, L.A., Mason, E.A., (1978). Direct determination of interaction potentials from gas viscosity measurements alone, Chemical Physics, 28 (1978) 313-318. doi.org/10.1016/0301-0104(78)80008-1.
- [5]. Maitland, G.C., Mason, E.A., Viehland, L.A., Wakeham, W.A., (1978). A justification of methods for the inversion of gas transport coefficients, Molecular Physics, 36 (1978) 797-816. doi.org/10.1080/00268977800101951.
- [6]. Viehland, L.A., Harrington, M.M., Mason, E.A., (1976). Direct determination of ion-neutral molecule interaction potentials from gaseous ion mobility measurements, Chemical Physics, 17 (1976) 433-441. doi.org/10.1016/S0301-0104(76)80007-9.

- [7]. Clancy, P., Gough, D.W., Matthews, G.P., Smith, E.B., Maitland, G.C., (1975). Simplified methods for the inversion of thermophysical data, *Molecular Physics*, 30 (1975) 1397-1407. doi.org/10.1080/00268977500102921.
- [8]. Gough, D.W., Maitland, G.C., Smith, E.B., (1972). The direct determination of intermolecular potential energy functions from gas viscosity measurements, *Molecular Physics*, 24 (1972) 151-161. doi.org/10.1080/00268977200101311.
- [9]. Gough, D.W., Matthews, G.P., Smith, E.B., Maitland, G.C., (1975). The direct determination of pair potential energy functions for mixed interactions: Ar-Kr, *Molecular Physics*, 29 (1975) 1759-1765. doi.org/10.1080/00268977500101551.
- [10]. Gough, D.W., Smith, E.B., Maitland, G.C., (1973). The intermolecular potential energy functions of krypton and xenon, *Molecular Physics*, 25 (1973) 1433-1441. doi.org/10.1080/00268977300101221.
- [11]. Gough, D.W., Smith, E.B., Maitland, G.C., (1974). The pair potential energy function for krypton, *Molecular Physics*, 27 (1974) 867-872. doi.org/10.1080/00268977400100781.
- [12]. Maitland, G.C., (1973). The determination of the intermolecular potential energy function of neon from spectroscopic, equilibrium and transport data, *Molecular Physics*, 26 (1973) 513-528. doi.org/10.1080/00268977300101851.
- [13]. Maitland, G.C., Smith, E.B., (1972). The direct determination of potential energy functions from second virial coefficients, *Molecular Physics*, 24 (1972) 1185-1201. doi.org/10.1080/00268977200102281.
- [14]. Assael, M.J., Mixafendi, S., Wakeham, W.A., (1986). The viscosity and thermal conductivity of normal hydrogen in the limit of zero density, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 15 (1986) 1315-1322. doi.org/10.1063/1.555764.
- [15]. Boushehri, A., Bzowski, J., Keřtin, J., Mason, E.A., (1987). Equilibrium and transport properties of eleven polyatomic gases at low density, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 16 (1987) 445-466. doi.org/10.1063/1.555800.
- [16]. Bzowski, J., Keřtin, J., Mason, E.A., Uribe, F.J., (1990). Equilibrium and transport properties of gas mixtures at low density: Eleven polyatomic gases and five noble gases, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 19 (1990) 1179-1232. doi.org/10.1063/1.555867.
- [17]. Moghadasi, J., Yousefi, F., Papari, M., Faghihi, M., Mohsenipour, A., (2009). Transport properties in mixtures involving carbon dioxide at low and moderate density: test of several intermolecular potential energies and comparison with experiment, *Heat and Mass Transfer*, 45 (2009) 1453-1466.
- [18]. Maghari, A., Behnejad, H., Nematbakhsh, F., (1999). Direct determination of the intermolecular potential for H_2-H_2 from viscosity correlation equation, *Journal of the Physical Society of Japan*, 68 (1999) 2276-2280. doi.org/10.1143/JPSJ.68.2276.
- [19]. Pack, R.T., Valentini, J.J., Becker, C.H., Buss, R.J., Lee, Y.T., (1982). Multiproperty empirical interatomic potentials for ArXe and KrXe, *The Journal of Chemical Physics*, 77 (1982) 5475-5485.
- [20]. Rainwater, J.C., (1984). On the phase space subdivision of the second virial coefficient and its consequences for kinetic theory, *The Journal of Chemical Physics*, 81 (1984) 495-510. doi.org/10.1063/1.447332.
- [21]. Friend, D.G., Rainwater, J.C., (1984). Transport properties of a moderately dense gas, *Chemical Physics Letters*, 107 (1984) 590-594. doi.org/10.1016/S0009-2614(84)85163-5.
- [22]. Rainwater, J.C., Friend, D.G., (1987). Second viscosity and thermal-conductivity virial coefficients of gases: Extension to low reduced temperature, *Physical Review A*, 36 (1987) 4062-4066. doi.org/10.1103/PhysRevA.36.4062.
- [23]. Tsuzuki, S., Uchimaru, T., Tanabe, K., (1993). Basis set effects on the intermolecular interaction of the H_2-H_2 system obtained using ab initio molecular orbital calculations with the Møller-Plesset perturbation correction, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 280 (1993) 273-281. doi.org/10.1016/0166-1280(93)80014-Q.
- [24]. Borysow, A., Jørgensen, U.G., Fu, Y., (2001). High-temperature (1000–7000 K) collision-induced absorption of H_2 pairs computed from the first principles, with application to cool and dense stellar atmospheres, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 68 (2001) 235-255. doi.org/10.1016/S0022-4073(00)00023-6.
- [25]. Heřelmann, A., Jansen, G., (2002). Intermolecular induction and exchange-induction energies from coupled-perturbed Kohn–Sham density functional theory, *Chemical Physics Letters*, 362 (2002) 319-325. doi.org/10.1016/S0009-2614(02)01097-7.
- [26]. Heřelmann, A., Jansen, G., (2003). Intermolecular dispersion energies from time-dependent density functional theory, *Chemical Physics Letters*, 367 (2003) 778-784. doi.org/10.1016/S0009-2614(02)01796-7.
- [27]. van der Pol, A., van der Avoird, A., Wormer, P.E.S., (1990). An abinitio intermolecular potential for the carbon monoxide dimer (CO)₂, *The Journal of Chemical Physics*, 92 (1990) 7498-7504. doi.org/10.1063/1.458185.
- [28]. Meredith, A.W., Stone, A.J., (1998). An ab initio and diffusion Monte Carlo study of the potential energy surface of the co dimer, *The Journal of Physical Chemistry A*, 102 (1998) 434-445. doi.org/10.1021/jp972114b.
- [29]. Rode, M., Sadlej, J., Moszynski, R., Wormer, P.E.S., van der Avoird, A., (1999). The importance of

- high-order correlation effects for the CO-CO interaction potential, *Chemical Physics Letters*, 314 (1999) 326-332. doi.org/10.1016/S0009-2614(99)01168-9.
- [30]. Heck, E.L., Dickinson, A.S., (1995). Traditional transport properties of CO, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 217 (1995) 107-123. doi.org/10.1016/0378-4371(95)00099-S. doi.org/10.1016/0378-4371(95)00099-S.
- [31]. Green, S., Thaddeus, P., (1976). Rotational excitation of CO by collisions with He, H, and H₂ under conditions in interstellar clouds, *The Astrophysical Journal* 205 (1976) 766-785.
- [32]. McKee, C.F., Storey, J.W.V., Watson, D.M., Green, S., (1982). Far-infrared rotational emission by carbon monoxide, *The Astrophysical Journal*, 259 (1982) 647-656.
- [33]. Schinke, R., Engel, V., Buck, U., Meyer, H., Diercksen, G.H.F., (1985). Rate constants for rotational transitions of CO scattered by para-hydrogen, *The Astrophysical Journal*, 299 (1985) 939-946. ISSN 0004-637X. ISSN 0004-637X.
- [34]. Jankowski, P., Szalewicz, K., (1998). Ab initio potential energy surface and infrared spectra of H₂-CO and D₂-CO van der Waals complexes, *The Journal of Chemical Physics*, 108 (1998) 3554-3565. doi.org/10.1063/1.475347. doi.org/10.1063/1.475347.
- [35]. Poling, B.E., Prausnitz, J.M., O'Connell, J.P., (2001). *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill, Boston. doi: 10.1036/0070116822.
- [36]. Viehland, L.A., Mason, E.A., Morrison, W.F., Flannery, M.R., (1975). Tables of transport collision integrals for (n, 6, 4) ion-neutral potentials, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 16 (1975) 495-514. doi.org/10.1016/0092-640X(75)90022-4.
- [37]. O'Hara, H., Smith, F.J., (1970). The efficient calculation of the transport properties of a dilute gas to a prescribed accuracy, *Journal of Computational Physics*, 5 (1970) 328-344. doi.org/10.1016/0021-9991(70)90065-3.
- [38]. O'Hara, H., Smith, F.J., (1971). Transport collision integrals for a dilute gas, *Computer Physics Communications*, 2 (1971) 47-54. doi.org/10.1016/0010-4655(71)90014-2.
- [39]. Dymond, J.H., Marsh, K.N., Wilhoit, R.C., Wong, K.C., (2003). *Virial Coefficients of Pure Gases and Mixtures*, Landolt-Börnstein, Berlin, Germany.
- [40]. Viehland, L.A., Chang, Y., (2010). Transport cross sections for collisions between particles, *Computer Physics Communications*, 181 (2010) 1687-1696. doi.org/10.1016/j.cpc.2010.06.008.
- [41]. Lucas, K., (1980). *Phase Equilibria and Fluid Properties in the Chemical Industry*, Dechema, Frankfurt.
- [42]. Chung, T.H., Ajlan, M., Lee, L.L., Starling, K.E., (1988). Generalized multiparameter correlation for non-polar and polar fluid transport properties, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 27 (1988) 671-679. doi.org/10.1021/ie00076a024.
- [43]. Chung, T.H., Lee, L.L., Starling, K.E., (1984). Applications of kinetic gas theories and multiparameter correlation for prediction of dilute gas viscosity and thermal conductivity, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 23 (1984) 8-13. doi.org/10.1021/i100013a002.
- [44]. Huber, M.L., (2007). *Thermophysical Properties of Hydrocarbon Mixtures Database (SUPERTRAPP)*, NIST Standard Reference Database in, U.S. Department of Commerce, NIST, Colorado.
- [45]. Keštin, J., Ro, S.T., Wakeham, W.A., (1983). The transport properties of binary mixtures of hydrogen with CO, CO₂ and CH₄, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 119 (1983) 615-638. doi.org/10.1016/0378-4371(83)90113-9.
- [46]. Vugts, H.F., Boerboom, A.J.H., Los, J., (1970). Diffusion coefficients of isotopic mixtures of CO and N₂, *Physica*, 50 (1970) 593-605. doi.org/10.1016/0031-8914(70)90216-8.
- [47]. Vargaftik, N., Vinogradov, Y.K., Yargin, V.S., (1996). *Handbook of Physical Properties of Liquids and Gases*, 3th ed., Begell House, Inc., New York. doi:10.1615/978-1-56700-063-4.0.
- [48]. Gavril, D., Atta, K.R., Karaiskakis, G., (2004). Determination of collision cross-sectional parameters from experimentally measured gas diffusion coefficients, *Fluid Phase Equilibria*, 218 (2004) 177-188. doi.org/10.1016/j.fluid.2003.12.010.
- [49]. Madan, M., (1953). Transport properties of some gas mixtures, *Proc. Nat. Inst. Sci. India*, 19 (1953) 713-719.
- [50]. Kielich, S., (1962). Second virial coefficients for unlike non-dipolar molecules, *Physica*, 28 (1962) 511-520. doi.org/10.1016/0031-8914(62)90038-1.
- [51]. McQuarrie, D.A., (1976). *Statistical Mechanics*, Harper & Row, Publishers, Inc., New York.
- [52]. Pople, J.A., (1954). The Statistical Mechanics of Assemblies of Axially Symmetric Molecules. II. Second Virial Coefficients, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 221 (1954) 508-516. doi.org/10.1098/rspa.1954.0045.
- [53]. Pople, J.A., (1954). The Statistical Mechanics of Assemblies of Axially Symmetric Molecules. I. General Theory, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 221 (1954) 498-507. doi.org/10.1098/rspa.1954.0044.

- [54]. Buckingham, A.D., Pople, J.A., (1955). The statistical mechanics of imperfect polar gases. Part 1.-Second virial coefficients, Transactions of the Faraday Society, 51 (1955) 1173-1179. doi.org/10.1039/TF9555101173.
- [55]. Kielich, S., (1965). The equation of state of multipolar gases, Physica, 31 (1965) 444-460. doi.org/10.1016/0031-8914(65)90072-8.
- [56]. Boushehri, A., Mason, E.A., Kestin, J., (1986). Improved tables for the calculation of nonspherical contributions to second virial coefficients, International Journal of Thermophysics, 7 (1986) 1115-1133.
- [57]. Maghari, A., Moosavi, H., (1997). Modified numerical tables for the calculation of non-spherical contribution to second virial coefficients and the correlation equations of state for CO₂, CS₂, and C₆H₆, Journal of Sciences, Islamic Republic of Iran, 8 (1997) 108-116.
- [58]. Hirschfelder, J.O., Curtiss, C.F., Bird, R.B., (1964). Molecular Theory of Gases and Liquids, 2nd ed., Wiley, New York.
- [59]. Mitroy, J., Bromley, M.W.J., (2005). Higher-order C_n dispersion coefficients for hydrogen, Physical Review A, 71 (2005) 032709. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.71.032709>.
- [60]. Elias, E., Hoang, N., Sommer, J., Schramm, B., (1986). Die zweiten Virialkoeffizienten von Helium-Gasmischungen im Bereich unterhalb Zimmertemperatur, Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie, 90 (1986) 342-351. doi.org/10.1002/bbpc.19860900406.



Calculation of Thermophysical Properties of Syn-gas at Low Pressures Using an Extended Morse Potential

Ebrahim Nemati-Kande 1, Ali Magharil and Amir H. Jalili2*

1. Department of Physical Chemistry, School of Chemistry, University of Tehran, Tehran, Iran

2. Gas Refining Technology Group, Research Institute of Petroleum Industry (RIPI), Tehran, Iran

jaliliah@ripi.ir

DOI: 10.22078/pr.2025.5556.3468

Received: October 26, 2024

Accepted: March 11, 2025

Introduction

Hydrogen has the potential to produce electricity and heat. It can also be used in fuel cells for electric vehicles and buildings. Because of this, hydrogen is being explored as a future clean fuel. Researchers are studying how well the hydrogen energy system can change the global energy landscape, especially in the transportation sector [1]. Another example of using hydrogen to make liquid fuels and important petrochemical products is making syngas (a mix of H₂ and CO) to use in the Fischer–Tropsch process [2]. At the same time, there are limits on the money available, so the equipment used to produce hydrogen and syngas must be designed to meet more specific requirements. These requirements demand accurate values for the thermophysical properties of fluid mixtures containing hydrogen.

The corresponding states approach provides an accurate method for calculating the transport properties of pure gases and mixtures in low and high density regions. Also, a report by Assael, et al. [3] employed semi-classical kinetic theory and a corresponding states method to calculate the low density viscosity and thermal conductivity of normal hydrogen. In a similar manner, the correlations for low density transport coefficients of simple polyatomic gases, including CO, in the temperature range of 100–3000 K were presented by Boushehri et al. [4]. Bzowski et al. [5] extended this approach to investigate the transport properties of gas mixtures comprising simple polyatomic gases, including CO and noble gases, at low density. Maghari

et al. [6] presented a relationship between the viscosity collision integrals of hydrogen over a wide range of temperatures from absolute zero to 3000 K, assuming zero density. An effective pair potential was obtained using the direct inversion method and a Morse-Spline-Van der Waals (MSV) three-step potential model was used to model the interaction between two H₂ molecules.

This study utilizes a combination of the inversion method and the MSV potential model to calculate the thermophysical properties of pure H₂ gas and its mixture with CO. This is useful because there is a lack of reliable experimental data for H₂, CO, and their binary mixtures in some temperature and pressure regions.

Materials and Methods

Method of Calculation

The kinetic theory of Chapman-Enskog [7] for a single dilute gas leads to the following expression for the viscosity coefficient η° :

$$\eta^\circ = \frac{5}{16} \left(\frac{mk_B T}{\pi} \right)^{1/2} \frac{f_\eta}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)} \quad (1)$$

$\Omega^{(2,2)*}(T^*)$ is the reduced viscosity collision integral as a function of reduced temperature, $T^* = k_B T / \epsilon$, k_B is Boltzmann's constant, ϵ is the energy scaling parameter in the intermolecular potential energy function, σ is a distance scaling parameter and m is the mass of the molecule. Moreover, the value of the correction factor, f_η , is close to unity. The self-diffusion coefficient, D ,

of a pure gas is related to reduced diffusion collision integral, $\Omega(1,1)^*(T^*)$, given by Equation 2 [7]:

$$D = \frac{3}{8p} \left(\frac{k_B^3 T^3}{\pi m} \right)^{1/2} \frac{f_D}{\sigma^2 \Omega^{(1,1)*}(T^*)} \quad (2)$$

where p is the pressure, and f_D is a higher order correction factor. The Chapman-Enskog solution of the Boltzmann integro-differential equation [7], provides a connection between collision integrals, $\Omega^{(l,s)}(T)$, and intermolecular pair potential energy, $u(r)$, through a series of integrals given by:

$$\theta(b) = \pi - 2b \int_{r_0}^{\infty} \frac{r^{-2} dr}{\sqrt{1 - (b^2/r^2) - u(r)/E}} \quad (3)$$

$$Q^{(l)}(E) = 2\pi \left[1 - \frac{1 + (-1)^l}{2(1+l)} \right]^{-1} \int_0^{\infty} (1 - \cos^l \theta) b db \quad (4)$$

$$\Omega^{(l,s)}(T) = \left[(s+1)! (k_B T)^{s+2} \right]^{-1} \int_0^{\infty} Q^{(l)}(E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) E^{s+1} dE \quad (5)$$

$\theta(b)$ is the scattering angle, $Q^{(l)}(E)$ is the transport collision cross section, E is the relative kinetic energy of colliding molecules, b is the impact parameter, r is the radial coordinate and r_0 is the distance of closest approach of two molecules. Superscripts l and s appearing in the collision integrals, $\Omega^{(l,s)}(T)$, denote weighting factors, which account for the mechanism of transport by molecular collision.

In this work, the reduced centrally symmetrical effective pair potentials, $u^*(r^*) = u/\varepsilon$, were obtained for interaction between H_2 - H_2 , CO - CO and H_2 - CO by inverting the experimental gas viscosity data at low density ($p \leq 1$ bar) using the direct inversion method [8, 9, 10]. $r^* = r/\sigma$ is the reduced distance between center-of-mass of interacting molecules in which σ is a distance scaling parameter, such that $u(\sigma) = 0$, and is the depth of the potential well.

The direct inversion procedure is based on the idea that at a given temperature, there is a separation distance, r , at which the potential $u(r)$ is approximately equal to $k_B T$ and the viscosity collision integral, $\Omega^{(2,2)}$, is approximately equal to πr^2 . It is always possible for a given intermolecular potential to find a function, $G^n(T^*)$, for which this idea becomes exact through the equations.

$$r = \sqrt{\Omega^{(2,2)}/\pi} \quad (6)$$

$$u_n(r) = k_B T G_n^n(T^*) \quad (7)$$

where $G_n^n(T^*)$ is the n th inversion function and the subscript n refers to the n th iteration number. Equations 6 and 7 are central equations in the inversion scheme. The Lennard-Jones (12,6) model was used as the initial potential guess to estimate $G_n^n(T^*) = u_0^*/T^*$, which was iteratively used to minimize the objective function $O.F. = |[\Omega^{(2,2)*}(T^*)]_{\text{exp}} - [\Omega^{(2,2)*}(T^*)]_{\text{cal}}|$.

Results and Discussion

The INVERT potential (symbols) obtained iteratively for H_2 - H_2 , CO - CO , and H_2 - CO pairs are compared with the MSV-fitted model (lines) in Fig. 1. It is evident that the MSV model adequately represents the INVERT potentials of interaction. As illustrated in Figs. 2 and 3, the viscosity and diffusion coefficient of pure gases and mixtures, calculated from the MSV potential model, exhibit a high degree of agreement with the corresponding experimental values. As illustrated in Fig. 4, the MSV model demonstrates a high degree of predictive accuracy in calculating the second virial coefficients of H_2 and CO gases, as well as the interaction second virial coefficient, B_{12} , of the H_2 - CO pair. The second virial coefficients were calculated according to the perturbation method of Pople et al., by considering the total intermolecular interaction of molecular pairs as the sum of spherical and non-spherical n th-order electrostatic contributions [11, 12].

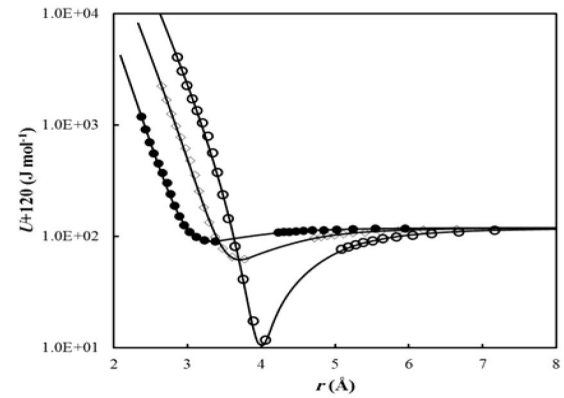


Fig. 1 Comparison of inverted potential, $U(r)$, with the MSV fitted potential (continuous lines) for H_2 - H_2 : (●), CO - CO (○) and H_2 - CO (◇) pairs.

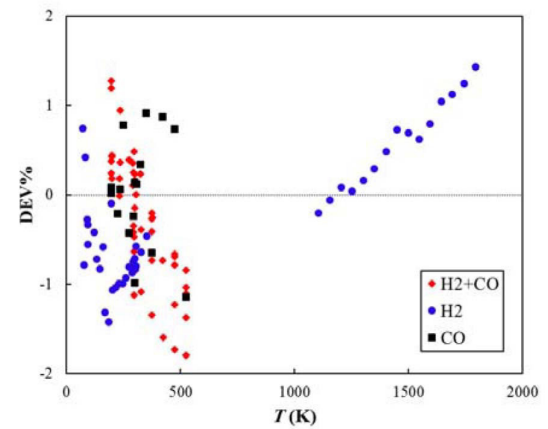


Fig. 2 Deviation percent (DEV%) of the calculated viscosity, using the MSV potential model, from the experimental values for pure H_2 gas (●), pure CO gas (■), and H_2 - CO binary gaseous mixtures (◇).

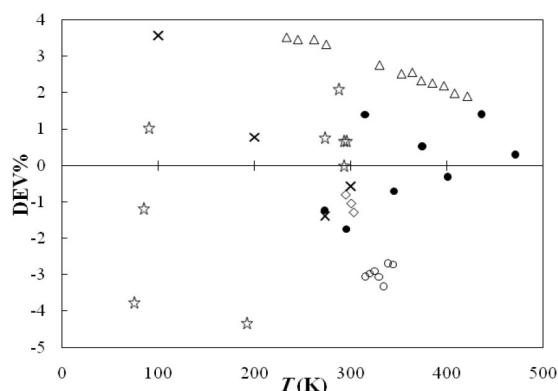


Fig. 3 Deviation percent (DEV%) of the calculated diffusion coefficient, using the MSV potential model, from the experimental values for pure H_2 gas (○), pure CO gas (Δ), and H_2 -CO binary gaseous mixtures (●, ○, ×, ☆).

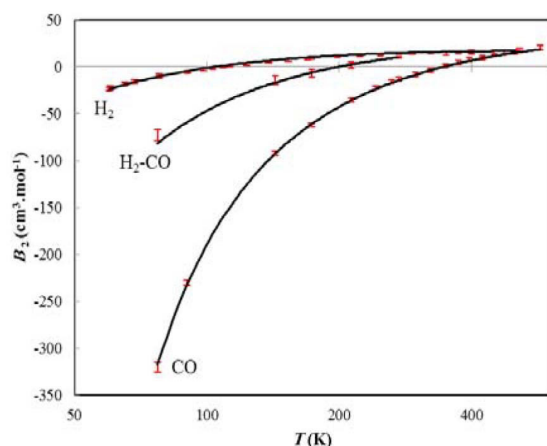


Fig. 4 Comparison of the calculated second virial coefficients, using the MSV potential model (continuous lines), with the experimental values (points) for pure H_2 gas, pure CO gas and H_2 -CO interaction.

Conclusions

The inversion method of the experimental viscosity and second virial coefficient data of dilute gases is one of the appropriate statistical mechanical-based approaches to obtain the effective interaction energy of small monoatomic and diatomic molecular systems. The utilization of the interaction potential energy, derived from the inversion method and the Chapman-Enskog theory, facilitates the calculation of the thermophysical properties of pure and mixed diatomic gases with a high degree of accuracy. Moreover, this method is particularly advantageous in temperature domains where experimental data is not available. Ultimately, the three-step MSV potential model, in addition to its excellent fit of intermolecular potential data, has the capacity to calculate the transport and equilibrium properties of pure and mixed gases with a high degree of accuracy.

References

1. Li, Z., Zhang, W., Zhang, R., & Sun, H. (2020). Development of renewable energy multi-energy complementary hydrogen energy system (A Case Study in China): A review. *Energy Exploration & Exploitation*, 38(6), 2099-2127. doi.org/10.1177/0144598720953512.
2. Jalili, A. H., & Sina, M. (2008). Isobaric Vapor–Liquid Equilibria of Hexane+ 1-Decene and Octane+ 1-Decene Mixtures. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 53(2), 398-402. doi.org/10.1021/jc700445y.
3. Assael, M. J., Mixafendi, S., & Wakeham, W. A. (1986). The viscosity and thermal conductivity of normal hydrogen in the limit of zero density. *Journal of physical and chemical reference data*, 15(4), 1315-1322. doi.org/10.1063/1.555764.
4. Boushehri, A., Bzowski, J., Keřtin, J., & Mason, E. A. (1987). Equilibrium and transport properties of eleven polyatomic gases at low density. *Journal of physical and chemical reference data*, 16(3), 445-466. doi.org/10.1063/1.555800.
5. Bzowski, J., Keřtin, J., Mason, E. A., & Uribe, F. J. (1990). Equilibrium and transport properties of gas mixtures at low density: Eleven polyatomic gases and five noble gases. *Journal of physical and chemical reference data*, 19(5), 1179-1232. doi.org/10.1063/1.555867.
6. Maghari, A., Behnejad, H., & Nematbakhsh, F. (1999). Direct Determination of the Intermolecular Potential for H_2 - H_2 from a Viscosity Correlation Equation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 68(7), 2276-2280. ISSN (Online) 13474073.
7. Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F., & Bird, R. B. (1964). *The molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons.
8. Maitland, G. C., & Smith, E. B. (1972). The direct determination of potential energy functions from second virial coefficients. *Molecular Physics*, 24(6), 1185-1201. doi.org/10.1080/00268977200102281.
9. Gough, D. W., Maitland, G. C., & Smith, E. B. (1972). The direct determination of intermolecular potential energy functions from gas viscosity measurements. *Molecular Physics*, 24(1), 151-161. doi.org/10.1080/00268977200101311.
10. Gough, D. W., Smith, E. B., & Maitland, G. C. (1974). The pair potential energy function for krypton. *Molecular Physics*, 27(4), 867-872. doi.org/10.1080/00268977400100781.
11. Pople, J. A. (1954). The statistical mechanics of assemblies of axially symmetric molecules-II. Second virial coefficients. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 221(1147), 508-516. doi.org/10.1098/rspa.1954.0045.

12. Pople, J. A. (1954). The statistical mechanics of assemblies of axially symmetric molecules-I. General theory. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, 221(1147), 498-507. doi.org/10.1098/rspa.1954.0044.

ویژده نامه توسعه زنجیره فناوری های هیدروژنی

محاسبه خواص ترموفیزیکی گاز سنتز در فشار پایین با استفاده از پتانسیل بین مولکولی مورس تعمیم یافته (پیوست)

ابراهیم نعمتی کنده^۱، علی مقاری^۲ و امیر حسین جلیلی^{۳*}

۱- دانشکده شیمی، دانشگاه ارومیه، ایران

۲- دانشکده شیمی، دانشکده گان علوم پایه، دانشگاه تهران، ایران

۳- گروه فن آوری های تصفیه گاز، پژوهشکده فن آوری های فراورش و انتقال گاز، پژوهشگاه صنعت نفت، ایران

تاریخ پذیرش:

تاریخ دریافت:

 $Q_{ij}^{(l)*}$ وانتگرال های برخورد توسط روابط زیر تعریف

می شوند:

$$Q_{ij}^{(l)*}(E^*) = 2 \left[1 - \frac{1 + (-1)^l}{2(l+1)} \right]^{-1} \int_0^\infty (1 - \cos^l x) b^* db^* \quad (\text{پ} ۳)$$

(پ ۴)

$$\Omega_{ij}^{(l,s)*}(T_{ij}^*) = \left[(s+1)! T_{ij}^{*(s+2)} \right]^{-1} \int_0^\infty Q_{ij}^{(l)*}(E^*) e^{-E^*/T_{ij}^*} E^{*(s+1)} dE^*$$

که در آن $T_{ij}^* = kT / \varepsilon_{ij}$ دمای کاهش یافته است.

برخی از نسبت های انتگرال های برخورد که در

روابط حاصل از نظریه جنبشی برای ضرائب انتقالی

به کار برده می شوند عبارت است از:

ضریب ویسکوزیته η^0 یک گاز خالص عبارت است از:

$$\eta^0 = \frac{5}{16} \left(\frac{mkT}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)} \quad (\text{پ} ۵)$$

ویسکوزیته برای یک مخلوط دوتایی عبارت است از:

$$\eta_{mix} = \frac{1 + \varepsilon_\eta}{X_\eta + Y_\eta} \quad (\text{پ} ۶)$$

که در آن

$$X_\eta = \frac{x_1^2}{\eta_1} + \frac{2x_1x_2}{\eta_{12}} + \frac{x_2^2}{\eta_2} \quad (\text{پ} ۷)$$

$$Y_\eta = \frac{3}{5} A_{12}^* \left\{ \frac{x_1^2}{\eta_1} \left(\frac{m_1}{m_2} \right) + \frac{2x_1x_2}{\eta_{12}} \left[\frac{(m_1 + m_2)^2}{4m_1m_2} \times \left(\frac{\eta_{12}}{\eta_1 + \eta_2} \right) \right] + \frac{x_2^2}{\eta_2} \left(\frac{m_2}{m_1} \right) \right\}$$

$$Z_\eta = \frac{3}{5} A_{12}^* \left\{ x_1^2 \left(\frac{m_1}{m_2} \right) + 2x_1x_2 \left[\frac{(m_1 + m_2)^2}{4m_1m_2} \times \left(\frac{\eta_{12}}{\eta_1} \right) + \frac{\eta_{12}}{\eta_2} - 1 \right] + x_2^2 \left(\frac{m_2}{m_1} \right) \right\}$$

خواص انتقالی از حل چپمن- انسکوگ رابطه

بولتزمن

در اینجا به اختصار به توضیح نتایج حاصل از حل

چپمن- انسکوگ معادله بولتزمن برای ضرائب

انتقالی^۱ گازهای رقیق می پردازیم. برای سیستمی

که تحت تاثیر انرژی پتانسیل بین مولکولی جفتی

قرار دارد، زاویه انحراف در برخورد دوتایی عبارت

است از:

$$\chi(b^*, E^*) = \pi - 2b^* \int_{r_0^*}^\infty \frac{dr / r^{*2}}{\left[1 - \frac{b^{*2}}{r^{*2}} - \frac{u_{ij}^*(r^*)}{E^*} \right]^{1/2}} \quad (\text{پ} ۱)$$

که در آن انرژی پتانسیل کاهش یافته با رابطه

(پ ۲) تعریف می شود.

$$u_{ij}^*(r^*) = \frac{u_{ij}(r / \sigma_{ij})}{\varepsilon_{ij}} \quad (\text{پ} ۲)$$

و $E^* = E / \varepsilon_j$ انرژی جنبشی نسبی کاهش یافته درفرآیند برخورد، $b^* = b / \sigma_j$ پارامتر برخورد کاهشیافته، $r^* = r / \sigma_j$ فاصله بین مولکولی کاهش یافته،و $r_0^* = r_0 / \sigma_j$ نزدیک ترین فاصله رویارویی کاهش

یافته می باشد. سطح مقطع انتقالی کاهش یافته

*مسئول مکاتبات

آدرس الکترونیکی

jaliliah@ripi.ir
شناسه دیجیتال: (DOI: 10.22078/pr.2025.5556.3468)

ضریب ویسکوزیته برهم‌کنش به صورت زیر (پ ۱۱) است:

$$\alpha_T = (6c_{12}^* - 5) \left[\frac{x_1 S_1 - x_2 S_2}{x_1^2 Q_1 + x_1 x_2 Q_{12} + x_2^2 Q_2} \right] \quad (پ ۱۱)$$

$$S_1 \equiv \frac{m_1}{m_2} \left(\frac{2m_2}{m_1 + m_2} \right)^{1/2} \left[\frac{\Omega_{11}^{(2,2)*}}{\Omega_{12}^{(1,1)*}} \right] \left(\frac{\sigma_{11}}{\sigma_{12}} \right)^2 \quad (پ ۱۲)$$

$$Q_1 = \frac{2m_2}{(m_1 + m_2)^3} \left(\frac{2m_2}{m_1 + m_2} \right)^{1/2} \frac{\Omega_{11}^{(2,2)*}}{\Omega_{12}^{(1,1)*}} \left(\frac{\sigma_{11}}{\sigma_{12}} \right)^2 \times \left[\left(\frac{5}{2} - \frac{6}{5} B^* \right) m_1^2 + 3m_2^2 + \frac{8}{5} m_1 m_2 A_{12}^* \right] \quad (پ ۱۳)$$

$$Q_{12} = 15 \left(\frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 \left(\frac{5}{2} - \frac{6}{5} B_{12}^* \right) + \frac{4m_1 m_2 A_{12}^*}{(m_1 + m_2)^2} \left(11 - \frac{12}{5} B_{12}^* \right) \quad (پ ۱۴)$$

$$+ \frac{8}{5} \frac{m_1 m_2}{(m_1 m_2)^{1/2}} \frac{\Omega_{11}^{(2,2)*}}{\Omega_{12}^{(1,1)*}} \frac{\Omega_{22}^{(2,2)*}}{\Omega_{12}^{(1,1)*}} \left(\frac{\sigma_{11}}{\sigma_{12}} \right)^2 \left(\frac{\sigma_{22}}{\sigma_{12}} \right)^2$$

۱ دوتایی عبارت است از: $D_{ij} = \frac{3}{16n} \left[\frac{2\pi kT (m_1 + m_2)}{m_1 m_2} \right]^{1/2} \frac{1}{\Omega_{ij}^{(1,1)*} (T^*)}$ (پ ۱۰)

۲ به دست می‌آیند.

جدول ۱ داده‌های تجربی مورد استفاده در مطالعه خواص گاز سنتز: ویسکوزیته در حد چگالی صفر (η^0).

ضریب نفوذ در حد چگالی صفر (D) و ضریب دوم ویریال (B)

منبع	نوع داده	دما / کلین	تعداد داده تجربی	خاصیت فیزیکی	سیستم
[۱]	pd	15/223-15/423	۶	η^0	H ₂
[۲]	pd	82-400	۸	η^0	
[۳]	pd	2128-1102	۲۳	η^0	
[۴]	pd	60-80	۳	η^0	
[۵]	pd	15/293-15/303	۲	η^0	
[۶]	pd	15/298-15/398	۵	η^0	
[۷]	pd	28/90-05/300	۱۷	η^0	
[۸]	pd	13/14-38/89	۷	η^0	
[۹]	pd	40/7-20/22	۵	η^0	
[۱۰]	pd	15/298	۱	η^0	
[۱۱]	pd	615/213-209/394	۱۵	η^0	
[۱۲]	pd	35/77-65/299	۱۱	η^0	
[۱۳]	pd	92/14-6/293	۵	η^0	
[۱۴]	pd	15/293	۱	η^0	
[۱۵]	pd	15/293-15/303	۲	η^0	
[۱۶]	pd	15/307-65/422	۴	η^0	
[۱۷]	pd	2/90-1/292	۴	η^0	
[۱۸]	pd	15/293-25/301	۷	η^0	
[۱۹]	sd	15/293-35/523	۴	η^0	

ادامه جدول ۱پ

H ₂	η^0	۱	15/296	sd	[۲۰]
	η^0	۱۲	15/195-35/523	sd	[۲۱]
	η^0	۳۰	60-2000	sd	[۲۲]
	η^0	۳۰	15/73-15/1273	sd	[۲۳]
	η^0	۲۲	30-1500	sd	[۲۴]
	η^0	۱۵۲	523-288	pd	[۲۳]
	B	۳۰	500-70	pd	[۲۵]
	B	۵۲	423-90	sd	[۲۵]
	D	۹	5/75-296	NA	[۲۶]
	مجموع	۴۶۸	2128-4/7		
CO	η^0	۳۹	72/288-07/681	pd	[۲۷]
	η^0	۱۷	4/117-77/305	pd	[۲۸]
	η^0	۵	15/298-15/473	pd	[۲۹]
	η^0	۱	15/298	pd	[۳۰]
	η^0	۸	273-1300	pd	[۳۱]
	η^0	۴	85/294-4/271	sd	[۳۲]
	η^0	۷۱	523-273	pd	[۲۳]
	B	۱۷	573-77	pd	[۳۳]
	D	۱۲	17/233-8/421	NA	[۳۴]
	D	۲۸	3273-100	NA	[۳۵]
	مجموع	۲۰۲	573-77		
CO + H ₂	η^0	۴	15/303-15/295	pd	[۳۶]
	η^0	۳۹	15/523-15/195	pd	[۲۳]
	η^0	۶	295-195	sd	[۲]
	η^0	۱۵۶	523-273	pd	[۲۳]
	B	۵	273-77	pd	[۲۵]
	D	۸	471-273	NA	[۲۴]
	D	۳	15/295-15/303	NA	[۲۶]
	D	۴	100-300	NA	[۲]
	D	۷	2/315-9/343	NA	[۳۷]
	مجموع	۲۳۲	600-77		
مجموع		۹۰۲	2128-7		

pd: داده‌های اولیه با صحت بالا
sd: داده‌های ثانویه با صحت کمتر از داده‌های اولیه
NA: صحت داده‌ها قابل ارزیابی نیست.

جدول پ ۲ خواص انتقالی برای گازهای H_2 (۱)، CO (۲) و مخلوط هم مولار آنها (۱۲) به صورت تابعی از دما.

T	η_{mix}	η_1	η_2	α_T	D_{12}	D_1	D_2	B_{12}	B_1	B_2
K	μP	μP	μP		cm^2/s	cm^2/s	cm^2/s	cm^3/mol	cm^3/mol	cm^3/mol
۷۰	۴۶/۵۲۸	۳۲/۱۵۷	۴۷/۱۴۱	۰/۰۶۵۴	۰/۰۵۴۸	۰/۱۲۰۸	۰/۰۱۲۹	-	-۱۵/۲۲	-۳۹۰/۳۷
۸۰	۵۳/۰۳۲	۳۵/۷۴۵	۵۴/۰۳۶	۰/۰۹۸۶	۰/۰۷۱۰	۰/۱۵۳۷	۰/۰۱۶۹	-۷۵/۹۶	-۹/۰۷	-۲۹۵/۸۸
۹۰	۵۹/۴۲۴	۳۹/۱۲۶	۶۰/۹۲۶	۰/۱۲۸۵	۰/۰۸۹۰	۰/۱۸۹۷	۰/۰۲۱۴	-۵۹/۲۲	-۴/۵۶	-۲۳۳/۵۳
۱۰۰	۶۵/۶۷۸	۴۲/۳۳۵	۶۷/۷۵۸	۰/۱۵۴۹	۰/۱۰۸۷	۰/۲۲۸۵	۰/۰۲۶۴	-۴۶/۷۴	-۱/۱۳	-۱۸۹/۶۲
۱۵۰	۹۴/۶۱۲	۵۶/۵۴۸	۱۰۰/۱۳۷	۰/۲۴۴۶	۰/۲۲۹۷	۰/۴۶۱۸	۰/۰۵۸۱	-۱۳/۸۵	۸/۱۹	-۸۳/۷۳
۲۰۰	۱۲۰/۰۱۲	۶۸/۸۳۱	۱۲۹/۰۳۴	۰/۲۹۲۱	۰/۳۸۴۱	۰/۷۵۴۵	۰/۰۹۹۶	۰/۱۷	۱۲/۱۵	-۴۲/۵۸
۲۵۰	۱۴۲/۷۳۲	۷۹/۹۵۷	۱۵۴/۹۲۲	۰/۳۱۹۲	۰/۵۶۷۷	۱/۱۰۱۰	۰/۱۴۹۷	۷/۷۲	۱۴/۲۲	-۲۱/۰۶
۳۰۰	۱۶۳/۴۷۸	۹۰/۳۰۸	۱۷۸/۴۸۱	۰/۳۳۵۸	۰/۷۷۸۱	۱/۴۹۷۷	۰/۲۰۷۵	۱۲/۳۵	۱۵/۴۱	-۸/۰۰
۳۵۰	۱۸۲/۷۴۱	۱۰۰/۱۰۸	۲۰۰/۲۵۶	۰/۳۴۶۵	۱/۰۱۳۵	۱/۹۴۱۵	۰/۲۷۲۴	۱۵/۴۲	۱۶/۱۴	۰/۷۱
۴۰۰	۲۰۰/۱۸۶۰	۱۰۹/۵۰۰	۲۲۰/۶۴۲	۰/۳۵۳۷	۱/۲۷۲۶	۲/۴۳۰۲	۰/۳۴۳۹	۱۷/۵۶	۱۶/۶۰	۶/۸۶
۴۵۰	۲۱۸/۰۷۲	۱۱۸/۵۷۷	۲۳۹/۹۳۰	۰/۳۵۸۷	۱/۵۵۴۴	۲/۹۶۱۶	۰/۴۲۱۷	۱۹/۱۱	۱۶/۸۹	۱۱/۴۰
۵۰۰	۲۳۴/۵۵۱	۱۲۷/۴۰۳	۲۵۸/۳۳۳	۰/۳۶۲۳	۱/۸۵۸۱	۳/۵۳۳۷	۰/۵۰۵۶	۲۰/۲۷	۱۷/۰۷	۱۴/۸۷
۶۰۰	۲۶۵/۷۹۷	۱۴۴/۴۴۳	۲۹۳/۱۰۱	۰/۳۶۶۹	۲/۵۲۸۳	۴/۷۹۲۸	۰/۶۹۰۵	۲۱/۸۳	۱۷/۲۴	۱۹/۷۶
۷۰۰	۲۹۵/۳۱۱	۱۶۰/۷۹۷	۳۲۵/۸۴۶	۰/۳۷۰۰	۳/۲۷۸۳	۶/۱۹۴۲	۰/۸۹۷۱	۲۲/۷۸	۱۷/۲۵	۲۲/۹۷
۸۰۰	۳۲۳/۵۲۰	۱۷۶/۵۳۸	۳۵۷/۱۰۸	۰/۳۷۲۷	۴/۱۰۴۲	۷/۷۲۶۲	۱/۱۲۴۱	۲۳/۳۷	۱۷/۱۸	۲۵/۱۸
۹۰۰	۳۵۰/۶۹۰	۱۹۱/۶۹۷	۳۸۷/۲۱۶	۰/۳۷۵۴	۵/۰۰۲۶	۹/۳۷۸۶	۱/۳۷۰۲	۲۳/۷۴	۱۷/۰۷	۲۶/۷۷
۱۰۰۰	۳۷۶/۹۸۳	۲۰۶/۲۹۲	۴۱۶/۳۶۷	۰/۳۷۸۴	۵/۹۷۰۳	۱۱/۱۴۲۴	۱/۶۳۴۵	۲۳/۹۶	۱۶/۹۳	۲۷/۹۴
۱۱۰۰	۴۰۲/۵۰۷	۲۲۰/۳۴۱	۴۴۴/۶۸۶	۰/۳۸۱۹	۷/۰۰۴۴	۱۳/۰۱۰۱	۱/۹۱۶۰	۲۴/۰۹	۱۶/۷۸	۲۸/۸۱
۱۲۰۰	۴۲۷/۳۳۰	۲۳۳/۸۶۳	۴۷۲/۲۵۰	۰/۳۸۵۸	۸/۱۰۲۰	۱۴/۹۷۵۱	۲/۲۱۳۷	۲۴/۱۵	۱۶/۶۲	۲۹/۴۷
۱۳۰۰	۴۵۱/۴۹۹	۲۴۶/۸۸۳	۴۹۹/۱۱۱	۰/۳۹۰۰	۹/۲۶۰۶	۱۷/۰۳۱۸	۲/۵۲۷۰	۲۴/۱۶	۱۶/۴۶	۲۹/۹۷
۱۴۰۰	۴۷۵/۰۵۰	۲۵۹/۴۲۳	۵۲۵/۳۰۳	۰/۳۹۴۵	۱۰/۴۷۷۸	۱۹/۱۷۵۰	۲/۸۵۵۰	۲۴/۱۳	۱۶/۳۱	۳۰/۳۵
۱۵۰۰	۴۹۸/۰۱۰	۲۷۱/۵۰۹	۵۵۰/۸۵۴	۰/۳۹۹۲	۱۱/۷۵۱۲	۲۱/۴۰۰۶	۳/۱۹۷۱	۲۴/۰۸	۱۶/۱۵	۳۰/۶۴
۱۶۰۰	۵۲۰/۴۰۳	۲۸۳/۱۶۸	۵۷۵/۷۸۷	۰/۴۰۴۱	۱۳/۰۷۸۶	۲۳/۷۰۴۷	۳/۵۵۲۷	۲۴/۰۲	۱۶/۰۰	۳۰/۸۶
۱۷۰۰	۵۴۲/۲۴۸	۲۹۴/۴۲۵	۶۰۰/۱۲۲	۰/۴۰۹۰	۱۴/۴۵۸۱	۲۶/۰۸۴۰	۳/۹۲۱۲	۲۳/۹۳	۱۵/۸۵	۳۱/۰۲
۱۸۰۰	۵۶۳/۵۶۶	۳۰۵/۳۰۴	۶۲۳/۸۷۸	۰/۴۱۴۰	۱۵/۸۸۷۷	۲۸/۵۳۵۴	۴/۳۰۲۱	۲۳/۸۴	۱۵/۷۱	۳۱/۱۴
۱۹۰۰	۵۸۴/۳۷۴	۳۱۵/۸۲۹	۶۴۷/۰۷۴	۰/۴۱۸۹	۱۷/۳۶۵۷	۳۱/۰۵۶۴	۴/۶۹۵۰	۲۳/۷۴	۱۵/۵۶	۳۱/۲۲
۲۰۰۰	۶۰۴/۶۹۲	۳۲۶/۰۲۴	۶۶۹/۷۲۸	۰/۴۲۳۷	۱۸/۸۹۰۴	۳۳/۶۴۴۵	۵/۰۹۹۴	۲۳/۶۴	۱۵/۴۳	۳۱/۲۸

جدول پ ۳ انتگرال‌های برخورد بدون بعد به صورت تابعی از دمای کاهش یافته

$\log_0 T^*$	$\Omega_{ij}^{(2,2)*}$	$A_{ij}^* \equiv \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}$	$B_{ij}^* \equiv \frac{5\Omega_{ij}^{(1,2)*} - 4\Omega_{ij}^{(1,3)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}$	$C_{ij}^* \equiv \frac{\Omega_{ij}^{(1,2)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}$	$E_{ij}^* \equiv \frac{\Omega_{ij}^{(2,3)*}}{\Omega_{ij}^{(2,2)*}}$	$F_{ij}^* \equiv \frac{\Omega_{ij}^{(3,3)*}}{\Omega_{ij}^{(1,1)*}}$
-۱/۰	۷/۰۶۳۸۲۰	۱/۰۳۹۹۳۰	۱/۲۸۲۳۷۰	۰/۶۶۵۳۰۸	۰/۷۵۸۸۴۳	۰/۷۴۱۴۱۰
-۰/۹	۵/۶۸۵۱۶۰	۱/۰۵۰۶۵۰	۱/۲۶۳۴۶۰	۰/۶۷۹۷۶۱	۰/۷۷۰۱۳۹	۰/۷۵۸۵۷۲
-۰/۸	۴/۶۲۸۸۸۰	۱/۰۶۱۵۱۰	۱/۲۴۲۰۴۰	۰/۶۹۸۴۷۵	۰/۷۸۳۹۷۹	۰/۷۷۹۲۴۰
-۰/۷	۳/۸۲۱۴۳۰	۱/۰۷۱۷۷۰	۱/۲۱۹۶۷۰	۰/۷۲۱۲۶۲	۰/۸۰۰۱۶۲	۰/۸۰۳۰۷۱
-۰/۶	۳/۲۰۴۹۱۰	۱/۰۸۰۷۷۰	۱/۲۰۰۷۳۰	۰/۷۴۶۹۳۸	۰/۸۱۷۹۸۲	۰/۸۲۸۳۷۴
-۰/۵	۲/۷۳۲۷۵۰	۱/۰۸۸۰۳۰	۱/۱۹۰۰۵۰	۰/۷۷۳۰۸۳	۰/۸۳۵۷۶۸	۰/۸۵۲۳۷۵
-۰/۴	۲/۳۶۶۵۰۰	۱/۰۹۳۱۴۰	۱/۱۸۸۱۹۰	۰/۷۹۶۸۶۹	۰/۸۵۱۲۲۰	۰/۸۷۲۵۲۵
-۰/۳	۲/۰۷۵۲۸۰	۱/۰۹۵۴۹۰	۱/۱۸۹۷۸۰	۰/۸۱۶۶۲۱	۰/۸۶۳۰۴۸	۰/۸۸۷۸۰۹
-۰/۲	۱/۸۳۷۳۲۰	۱/۰۹۴۷۷۰	۱/۱۸۷۴۴۰	۰/۸۳۲۶۴۶	۰/۸۷۲۲۴۷	۰/۸۹۹۰۴۴
-۰/۱	۱/۶۴۰۰۳۰	۱/۰۹۱۸۱۰	۱/۱۷۷۷۰۰	۰/۸۴۶۶۶۳	۰/۸۸۱۲۷۲	۰/۹۰۸۲۲۸
۰/۰	۱/۴۷۷۲۰۰	۱/۰۸۸۳۵۰	۱/۱۶۲۴۵۰	۰/۸۶۰۲۱۳	۰/۸۹۲۰۳۷	۰/۹۱۷۲۶۶
۰/۱	۱/۳۴۵۰۴۰	۱/۰۸۶۴۷۰	۱/۱۴۶۲۶۰	۰/۸۷۳۸۲۲	۰/۹۰۴۶۷۹	۰/۹۲۷۳۴۱
۰/۲	۱/۲۳۹۵۱۰	۱/۰۸۷۵۱۰	۱/۱۳۳۰۰۰	۰/۸۸۷۰۰۳	۰/۹۱۷۸۳۷	۰/۹۳۸۷۱۹
۰/۳	۱/۱۵۵۶۷۰	۱/۰۹۱۷۸۰	۱/۱۲۴۲۱۰	۰/۸۹۸۸۹۸	۰/۹۲۹۷۵۱	۰/۹۵۱۰۱۱
۰/۴	۱/۰۸۸۲۰۰	۱/۰۹۸۵۸۰	۱/۱۱۹۳۹۰	۰/۹۰۸۸۱۹	۰/۹۳۹۱۲۳	۰/۹۶۳۵۰۴
۰/۵	۱/۰۳۲۱۰۰	۱/۱۰۶۶۷۰	۱/۱۱۶۹۳۰	۰/۹۱۶۵۸۰	۰/۹۴۵۴۴۱	۰/۹۷۵۵۰۴
۰/۶	۰/۹۸۳۲۹۸	۱/۱۱۴۵۷۰	۱/۱۱۵۰۹۰	۰/۹۲۲۴۵۸	۰/۹۴۸۹۷۱	۰/۹۸۶۴۱۳
۰/۷	۰/۹۳۸۹۵۷	۱/۱۲۱۱۱۰	۱/۱۱۲۸۴۰	۰/۹۲۶۹۷۱	۰/۹۵۰۶۲۱	۰/۹۹۵۶۶۶
۰/۸	۰/۸۹۷۶۳۱	۱/۱۲۵۸۱۰	۱/۱۱۰۴۵۰	۰/۹۳۰۵۸۰	۰/۹۵۱۶۴۰	۱/۰۰۲۷۴۰
۰/۹	۰/۸۵۹۰۵۵	۱/۱۲۹۲۲۰	۱/۱۰۹۳۶۰	۰/۹۳۳۴۴۰	۰/۹۵۳۱۰۴	۱/۰۰۷۳۶۰
۱/۰	۰/۸۲۳۵۱۸	۱/۱۳۲۶۵۰	۱/۱۱۱۰۶۰	۰/۹۳۵۳۵۲	۰/۹۵۵۲۱۰	۱/۰۰۹۹۵۰
۱/۱	۰/۷۹۰۹۰۸	۱/۱۳۷۱۵۰	۱/۱۱۵۰۴۰	۰/۹۳۶۰۷۶	۰/۹۵۶۸۱۹	۱/۰۱۱۹۴۰
۱/۲	۰/۷۶۰۰۱۶	۱/۱۴۲۱۴۰	۱/۱۱۷۸۸۰	۰/۹۳۵۸۵۰	۰/۹۵۶۱۷۹	۱/۰۱۵۰۷۰
۱/۳	۰/۷۲۸۹۰۴	۱/۱۴۵۱۶۰	۱/۱۱۴۹۷۰	۰/۹۳۵۶۶۷	۰/۹۵۲۶۲۸	۱/۰۱۹۹۷۰
۱/۴	۰/۶۹۶۱۶۲	۱/۱۴۳۰۷۰	۱/۱۰۳۵۹۰	۰/۹۳۶۹۴۹	۰/۹۴۷۵۱۳	۱/۰۲۵۵۸۰
۱/۵	۰/۶۶۱۹۳۷	۱/۱۳۳۹۵۰	۱/۰۸۴۶۷۰	۰/۹۴۰۸۲۷	۰/۹۴۳۴۰۷	۱/۰۲۹۹۶۰
۱/۶	۰/۶۲۷۸۸۲	۱/۱۱۸۰۷۰	۱/۰۶۱۹۴۰	۰/۹۴۷۵۶۱	۰/۹۴۲۵۷۱	۱/۰۳۱۶۲۰
۱/۷	۰/۵۹۶۲۶۹	۱/۰۹۷۶۸۰	۱/۰۳۹۶۶۰	۰/۹۵۶۴۷۵	۰/۹۴۵۹۵۳	۱/۰۳۰۳۱۰
۱/۸	۰/۵۶۹۰۴۰	۱/۰۷۵۸۸۰	۱/۰۲۰۸۵۰	۰/۹۶۶۳۵۱	۰/۹۵۳۰۶۹	۱/۰۲۶۹۰۰
۱/۹	۰/۵۴۷۲۷۰	۱/۰۵۵۵۱۰	۱/۰۰۶۸۲۰	۰/۹۷۵۹۴۹	۰/۹۶۲۴۵۸	۱/۰۲۲۶۱۰
۲/۰	۰/۵۳۱۱۰۰	۱/۰۳۸۳۸۰	۰/۹۹۷۵۲۹	۰/۹۸۴۳۵۵	۰/۹۷۲۳۶۳	۱/۰۱۸۴۴۰

مراجع

- [1]. Barua, A. K., Afzal, M., Flynn, G. P., & Ross, J. (1964). Viscosity of hydrogen, deuterium, methane, and carbon monoxide from—50 to 150 C below 200 atmospheres. *The Journal of Chemical Physics*, 41(2), 374-378. doi.org/10.1063/1.1725877.
- [2]. Madan, M. P. (1953). Transport properties of some gas mixtures. In *Proc. Nat. Inst. Sci. India* (Vol. 19, p. 713).
- [3]. Guevara, F. A., McInteer, B. B., & Wageman, W. E. (1969). High-Temperature Viscosity Ratios for Hydrogen, Helium, Argon, and Nitrogen. *The Physics of Fluids*, 12(12), 2493-2505. doi.org/10.1063/1.1692386.
- [4]. Coremans, J. M. J., Van Itterbeek, A., Beenakker, J. M., Knaap, H. F. P., & Zandbergen, P. (1958). The viscosity of gaseous He, Ne, H₂ and D₂ below 80 K. *Physica*, 24(6-10), 557-576. doi.org/10.1016/S0031-8914(58)80070-1.
- [5]. J. Keštin, A. Nagashima (1964) Viscosity of the isotopes of hydrogen and their intermolecular force potentials, *Physics of Fluids* (1958-1988), 7, 730-734. doi.org/10.1063/1.1711275.
- [6]. A. Michels, A.C.J. Schipper, W.H. Rintoul (1953) The viscosity of hydrogen and deuterium at pressures up to 2000 atmospheres, *Physica*, 19, 1011-1028. doi.org/10.1016/S0031-8914(53)80112-6.
- [7]. Johnston, H. L., & McCloskey, K. E. (1940). Viscosities of Several Common Gases between 90° K. and Room Temperature. *The Journal of Physical Chemistry*, 44(9), 1038-1058. doi.org/10.1021/j150405a004.
- [8]. A. van Itterbeek, A. Claes (1938) Measurements on the viscosity of hydrogen- and deuterium gas between 293°K and 14°K, *Physica*, 5, 938-944. Van Itterbeek, A., & Claes, A. (1938). Measurements on the viscosity of hydrogen- and deuterium gas between 293 K and 14 K. *Physica*, 5(10), 938-944. doi.org/10.1016/S0031-8914(38)80036-7.
- [9]. E.G.D. Cohen, M.J. Offerhaus, J.M.J. van Leeuwen, B.W. Roos, J. De Boer (1956) The transport properties and the equation of state of gaseous para- and ortho-hydrogen and their mixtures below 40°K, *Physica*, 22, 791-815. doi.org/10.1016/S0031-8914(56)90032-5.
- [10]. Berg, R. F., & Moldover, M. R. (2012). Recommended viscosities of 11 dilute gases at 25° C. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 41(4). doi.org/10.1063/1.4765368.
- [11]. May, E. F., Berg, R. F., & Moldover, M. R. (2007). Reference viscosities of H₂, CH₄, Ar, and Xe at low densities. *International Journal of Thermophysics*, 28(4), 1085-1110.
- [12]. Menabde, N. E. (1965). Viscosity coefficient of hydrogen (H₂, D₂), neon (Ne²⁰, Ne²²) and helium (He3) isotopes in the temperature range— 195 to+ 25° C. *Soviet Atomic Energy*, 19(5), 1421-1422.
- [13]. Van Itterbeek, A., & Van Paemel, O. (1940). Measurements on the viscosity of neon, hydrogen, deuterium and helium as a function of the temperature, between room temperature and liquid hydrogen temperatures. *Physica*, 7(3), 265-272. doi.org/10.1016/S0031-8914(40)90115-X.
- [14]. Keštin, J., & Leidenfrost, W. (1959). An absolute determination of the viscosity of eleven gases over a range of pressures. *Physica*, 25(7-12), 1033-1062. doi.org/10.1016/0031-8914(59)90024-2.
- [15]. Keštin, J., & Yata, J. (1968). Viscosity and diffusion coefficient of six binary mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 49(11), 4780-4791. doi.org/10.1063/1.1669960.
- [16]. Pal, A. K., & Barua, A. K. (1967). Viscosity of Hydrogen—Nitrogen and Hydrogen—Ammonia Gas Mixtures. *Journal of Chemical Physics*, 47(1), 216-218.
- [17]. Van Itterbeek, A., Van Paemel, O., & Van Lierde, J. (1947). Measurements on the viscosity of gas mixtures. *Physica*, 13(1-3), 88-96. doi.org/10.1016/0031-8914(47)90072-4.
- [18]. Buddenberg, J. W., & Wilke, C. R. (1951). Viscosities of Some Mixed Gases. *The Journal of Physical Chemistry*, 55(9), 1491-1498. doi.org/10.1021/j150492a008.
- [19]. Trautz, M., & Kurz, F. (1931). Die Reibung, Wärmeleitung und Diffusion in Gasmischungen XV. Die Reibung von H₂, N₂O, CO₂ und C₃H₈ und ihren binären Gemischen. *Annalen der Physik*, 401(8), 981-1003. doi.org/10.1002/andp.19314010808.
- [20]. Ishida, Y. (1923). Determination of viscosities and of the Stokes-Millikan law constant by the oil-drop method. *Physical Review*, 21(5), 550. doi: https://doi.org/10.1103/PhysRev.21.550.
- [21]. Trautz, M., & Baumann, P. B. (1929). Die Reibung, Wärmeleitung und Diffusion in Gasmischungen. II. Die Reibung von H₂- N₂-und H₂- CO-Gemischen. *Annalen der Physik*, 394(6), 733-736. doi.org/10.1002/andp.19293940608.
- [22]. Maitland, G. C., & Smith, E. B. (1972). Critical reassessment of viscosities of 11 common gases. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 17(2), 150-156. doi.org/10.1021/jc60053a015.
- [23]. Golubev, I. J. F. (1970). *Viscosity of Gases and Gas Mixtures: A Handbook*, Israel Program for Scientific Translations.
- [24]. Vargaftik, N. B., Vinogradov, Y. K., & Yargin, V. S. (1996). *Handbook of physical properties of liquids and gases*. Begell House. doi:10.1615/978-1-56700-063-4.0.
- [25]. Frenkel, M., Marsh, K. N., Marsh, K. N., Dymond, J. H., Wilhoit, R. C., & Wong, K. C. (2002). *Virial co*

efficients of pure gases. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

[26]. Weissman, S., & Mason, E. A. (1962). Determination of gaseous-diffusion coefficients from viscosity measurements. *Journal of Chemical Physics*, 37(6), 1289-1300.

[27]. Vogel, E. (2012). Towards reference viscosities of carbon monoxide and nitrogen at low density using measurements between 290K and 680K as well as theoretically calculated viscosities. *International Journal of Thermophysics*, 33, 741-757.

[28]. Johnston, H. L., & Grilly, E. R. (1942). Viscosities of Carbon Monoxide, Helium, Neon, and Argon between 80° and 300° K. Coefficients of Viscosity. *The Journal of Physical Chemistry*, 46(8), 948-963. doi.org/10.1021/j150422a019.

[29]. Keřtin, J., Ro, S. T., & Wakeham, W. A. (1982). The Viscosity of Carbon-Monoxide and its Mixtures with Other Gases in the Temperature Range 25–200° C. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 86(8), 753-760. doi.org/10.1002/bbpc.19820860816.

[30]. Keřtin, J., Ro, S. T., & Wakeham, W. A. (1971). Reference values of the viscosity of twelve gases at 25° C. *Transactions of the Faraday Society*, 67, 2308-2313. doi.org/10.1039/TF9716702308.

[31]. Clifford, A. A., Gray, P., & Scott, A. C. (1975). Viscosities of gaseous argon, oxygen and carbon monoxide between 273 and 1300 K. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 1: Physical Chemistry in Condensed Phases*, 71, 875-882. doi.org/10.1039/F19757100875.

[32]. Trautz, M., & Melřter, A. (1930). Die reibung, wärmeleitung und diffusion in gasmischungen XI. Die reibung von H₂, N₂, CO, C₂H₄, O₂ und ihren binären gemischen. *Annalen der Physik*, 399(4), 409-426. doi.org/10.1002/andp.19303990404.

[33]. Van der Pol, A., Van der Avoird, A., & Wormer, P. E. S. (1990). An ab initio intermolecular potential for the carbon monoxide dimer (CO)₂. *The Journal of Chemical Physics*, 92(12), 7498-7504. doi.org/10.1063/1.458185.

[34]. Vugts, H. F., Boerboom, A. J. H., & Los, J. (1970). Diffusion coefficients of isotopic mixtures of CO and N₂. *Physica*, 50(4), 593-605. doi.org/10.1016/0031-8914(70)90216-8.

[35]. Winkelmann, J., & Lechner, M. D. (2007). Gases in gases, liquids and their mixtures. (No Title).

[36]. Keřtin, J., Ro, S. T., & Wakeham, W. A. (1983). The transport properties of binary mixtures of hydrogen with CO, CO₂ and CH₄. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 119(3), 615-638. doi.org/10.1016/0378-4371(83)90113-9.

[37]. Gavril, D., Atta, K. R., & Karaiskakis, G. (2004). Determination of collision cross-sectional parameters from experimentally measured gas diffusion coefficients. *Fluid Phase Equilibria*, 218(2), 177-188. doi.org/10.1016/j.fluid.2003.12.010.