



## معادله‌ی حالت تحلیلی برای فلزات مذاب قلیایی و قلیایی خاکی بر پایه‌ی ثابت‌های بحرانی

محمدحسن موسی‌زاده\*، زهرا موسی‌پور

پژوهشکده‌ی علوم هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۳۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران - ایران

**چکیده:** فلزات قلیایی از نقطه‌نظر خواص فیزیکی - شیمیایی دارای یک ترکیب منحصر به فرد هستند. از جمله می‌توان به بالا بودن رسانایی الکتریکی و گرمایی، کم بودن چگالی و گران‌روی، ساختار مایع در محدوده‌ی وسیعی از دما، بالا بودن گرمای نهان تبخیر، و ... اشاره نمود. این گونه فلزات به طور گسترده‌ای در علوم و فن‌آوری جدید استفاده می‌شوند. از جمله این که به عنوان خنک‌کننده در نیروگاه‌های هسته‌ای کاربرد وسیعی دارند. در این کار پژوهشی از معادله‌ی حالت اقتباس شده از نظریه‌ی اختلال مکانیک آماری که به آن معادله‌ی حالت ایهم، سانگ و میسون (ISM) گفته می‌شود استفاده شده است. این معادله‌ی حالت، سه پارامتر وابسته به دما دارد که عبارت‌اند از  $B_2(T)$  ضریب دوم ویریل،  $\alpha(T)$  که معیاری از نرمی نیروهای دافعه است، و  $b(T)$  حجم کنار گذاشته شده با استفاده از این سه پارامتر، روابط ساده‌ای براساس دما و چگالی در نقطه‌ی بحرانی پیشنهاد شده است. بررسی خواص حجمی فلزات قلیایی و قلیایی خاکی با روابط جدید نشان داد که مقادیر محاسبه شده در مقایسه با داده‌های تجربی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار رضایت‌بخش هستند.

**کلیدواژه‌ها:** فلزات قلیایی و قلیایی خاکی، ثابت‌های بحرانی، معادله‌ی حالت

## An Analytical Equation of State for Molten Alkaline and Alkaline Earth Metals from Critical Point Constants

M.H. Mousazadeh\*, Z. Mousapoor

Nuclear Science Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 11365-3486, Tehran - Iran

**Abstract:** Alkali metals have a unique combination of physicochemical properties, such as extremely high electrical and thermal conductivities, low densities and viscosities, wide temperature ranges of a liquid state, great heat of evaporation, etc. Therefore, they are widely used in modern science and technology, especially liquid alkali metals act as a coolant in nuclear power plants. In this work, we developed an equation of state (EoS) based on statistical-mechanical perturbation theory for alkaline and alkaline earth metals. The theoretical EoS undertaken is Ihm-Song-Mason (ISM), and there are three temperature-dependent quantities that are required to use the EoS: the second virial coefficients  $B_2(T)$ , an effective van der Waals covolume,  $b(T)$  and a correction factor,  $\alpha(T)$ . Those are calculated from a two-parameter corresponding states correlation, which is constructed with two constants as scaling parameters, i.e., the temperature,  $T_c$  and molar density  $\rho_c$  at critical points. This new correlation has been applied to the ISM EoS to predict the volumetric behavior of alkali and alkali earth metals. We have tested the predicted EoS against the experimental data. The results show that in comparison to previous works, the present correlation is more accurate and covers a much wider range of temperature and pressure.

**Keywords:** Alkaline and Alkaline Earth Metals, Critical Constants, Equation of State

\*email: mmousazadeh@aeoi.org.ir

تاریخ دریافت مقاله: ۹۰/۵/۱۲ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۱/۷/۱۲

**۱. مقدمه**

ضریب دوم ویریا را محاسبه و از این طریق برای سیال‌های غیرقطبی معادله‌ی حالت جدیدی ارائه دادند. بوشهری و میسون [۱۹] رابطه‌ی جدیدی برای پارامترهای وابسته به دما گزارش کردند که وابسته به گرمای نهان تبخیر<sup>(۶)</sup> و چگالی مایع ( $\Delta H_{l,p}$ ,  $\rho_{l,p}$ ) در نقطه‌ی سه گانه<sup>(۷)</sup> است. آن‌ها با این رابطه‌ها خواص فلزات قلیایی را مورد بررسی قرار دادند [۱۸]. رابطه‌های دیگری توسط قطعی و بوشهری [۱۶] براساس کشش سطحی و چگالی مایع در نقطه‌ی انجماد ( $\gamma_{fs}$ ,  $\rho_f$ ) معرفی شد. نتایج کار آن‌ها نشان داد که این روابط در محاسبه‌ی خواص ترمودینامیکی فلزات قلیایی دقیق‌تر از حالت قبل است.

اخیراً معادله‌ی حالت قابل قبولی برای محاسبه‌ی خواص فشار-حجم-دما برای مخلوط سیال‌ها [۱۳]، گازهای طبیعی مایع [۱۴، ۲۰]، پلی‌مرها [۲۱]، فلزات با مقاومت حرارتی<sup>(۸)</sup> بالا [۲۲] و مایعات یونی [۲۳] ارائه شده است. برنامه‌ی کاری در این مقاله با به کارگیری روابط جدید برای پارامترهای وابسته به دما براساس دما و چگالی در نقطه‌ی بحرانی استفاده شده است. نشان داده شده است که چگالی و دما در نقطه‌ی بحرانی برای به دست آوردن ضریب دوم ویریا در مقایسه با دیگر کارها [۱۵، ۱۶] قابل قبول‌تر است.

**۲. نظریه**

معادله‌ی حالت زیر توسط میسون و همکاران [۱۰، ۱۱، ۱۷] برای سیال‌های غیرقطبی ارائه شده است

$$\frac{p}{\rho RT} = 1 + p_{att} + p_{rep} \quad (1)$$

که در آن،

$$p_{att} = -\frac{(\alpha - B_v)\rho}{1 + 0.22\lambda b\rho}, \quad (2)$$

$$p_{rep} = \frac{\alpha\rho}{1 - \lambda b\rho}, \quad (3)$$

$$B_v = 2\pi \int_0^\infty (1 - e^{-\beta u}) r^2 dr, \quad (4)$$

$$\alpha(T) = 2\pi \int_0^\infty [1 - e^{-u_v(r)/kT}] r^2 dr, \quad (5)$$

$$b(T) \equiv \frac{2}{3} \pi \sigma^3 = \alpha + T \frac{d\alpha}{dT} = 2\pi \int_0^{r_m} [1 - (1 + \frac{u_v}{kT}) e^{-u_v/kT}] r^2 dr, \quad (6)$$

فلزات در حالت مایع و بخار، ساختار پیچیده‌ای دارند. اطلاعات مرتبط با خواص ترمودینامیکی این گروه از عناصر از اهمیت به سزایی برخوردار است. فلزات قلیایی، به واسطه‌ی انتقال خوب گرما، به عنوان خنک‌کننده در رآکتورهای تند استفاده می‌شوند. واکنش‌پذیری بالا با هوا و سمی بودن از معایب کار با این فلزات محسوب می‌شود [۱]. دمای بحرانی بالا و سمیت زیاد دلیل محدودیت در کار با این گونه فلزات در محیط‌های آزمایشگاهی است. این مشکلات، بر اهمیت بررسی‌های نظری افزوده است [۲، ۳، ۴، ۵، ۶]. استفاده از معادله‌ی حالت برای محاسبه‌ی خواص ترمودینامیکی سیال‌ها ابزار مفید شناخته شده‌ای است.

مایع‌ها با استفاده از مکانیک آماری به صورت نظری مورد مطالعه قرار می‌گیرند. نظریه‌ی اختلال<sup>(۱)</sup> مایع‌ها در طی سه دهه‌ی گذشته توسعه‌ی قابل توجهی یافته است [۸، ۹]. با توجه به این که ساختار اولیه‌ی سیال‌های چگال براساس نیروهای دافعه‌ی صرف، قابل بررسی است، لذا سیال‌های کروی و غیرکروی را می‌توان به عنوان مرجع اولیه‌ی مناسبی در نظر گرفت. در نظریه‌ی اختلال برهم‌کنش مولکولی سیستم را می‌توان به دو قسمت دافعه و جاذبه‌ی تابع پتانسیل تقسیم نمود. در این حالت سهم دافعه به عنوان سیستم مرجع (کره‌ی سخت)<sup>(۲)</sup> بدون هیچ اثری از جاذبه در نظر گرفته می‌شود. برهم‌کنش مولکولی جاذبه به عنوان اختلال در سیستم مرجع در نظر گرفته می‌شود. اثر نیروهای جاذبه و نرمی نیروهای دافعه از طریق نظریه‌ی اختلال مکانیک آماری مورد بررسی قرار می‌گیرد. با استفاده از مکانیک آماری یک معادله‌ی حالت تحلیلی جدید توسط سانگ و میسون ارائه شده است [۱۰]. در این معادله‌ی حالت سه انتگرال ظاهر می‌شود که عبارت‌اند از: ضریب دوم ویریا<sup>(۳)</sup>  $B_2(T)$ ، یک ضریب مقیاس-گذاری<sup>(۴)</sup>  $\alpha(T)$ ، و حجم کنار گذاشته شده واندروالسی  $b(T)$ . تمام این انتگرال‌ها با داشتن تابع پتانسیل سیستم قابل محاسبه‌اند. کارهای انجام شده با این معادله‌ی حالت صحت این روش را برای سیالات خالص و مخلوط نمونه‌های غیرقطبی نشان می‌دهد [۱۲، ۱۳، ۱۴، ۱۵، ۱۶].

در سال‌های اخیر روش‌های مختلفی که از پارامترهای وابسته به دما استفاده می‌کنند، ارائه شده است. تاو و میسون [۱۷] با استفاده از همبستگی حالت‌های متناظر<sup>(۵)</sup> و روابط پیتزر [۱۸]



بنابراین مقادیر دمای کاهیده  $kT/\varepsilon$  و حجم کاهیده  $V_B/r_m^3$  وابسته به مدل پتانسیل‌اند، اما  $T_B$  و  $V_B$  دارای مقادیر تجربی ثابت‌اند.

با توجه به آن‌چه که گفته شد، مقادیر کاهیده  $\alpha/V_B$  و  $b/V_B$  به صورت تابع‌هایی از  $T/T_B$  برای مدل‌های مختلف  $u(r)$  تقریباً رفتار یکسانی دارند. برازش داده‌های  $B_2(T)$  باعث حذف اثرات ناشی از اختلاف موجود در هر پتانسیل  $u(r)$  می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که مقادیر  $\alpha/V_B$  و  $b/V_B$  به پتانسیل حساس نیستند و برای اهداف عملی می‌توانند به عنوان تابع‌های جهانی  $T/T_B$ <sup>(۱۱)</sup> در نظر گرفته شوند [۱۱]. لذا، می‌توان نتیجه گرفت که دانستن  $B_2(T)$  برای تعیین مقادیر درست  $\alpha/V_B$  و  $b/V_B$  کافی است و با تعیین این سه پارامتر، کل معادله‌ی حالت را که ناحیه‌ی مایع را هم شامل می‌شود، می‌توان معرفی کرد.

رابطه‌های تجربی برای  $\alpha/V_B$  و  $b/V_B$  براساس تابعی از  $T/T_B$  موجود است [۲۵]. بنابراین ضریب دوم ویرال در استفاده از معادله‌ی حالت نقش اصلی را بازی می‌کند، به این معنی که منبع مستقیم و یا غیرمستقیم محاسبه‌ی دو پارامتر دیگر ( $\alpha$  و  $b$ ) است.

پارامترهای  $B_2$ ،  $\alpha$ ، و  $b$  را می‌توان با استفاده از رابطه‌های تجربی سانگ و میسون [۲۵] برحسب ثابت‌های بحرانی، مجدداً مقیاس‌بندی کرد. لذا،

$$B_2(T)P_c = 0.3892 - 0.7310(T_r)^{-1} - 1.0309(T_r)^{-2} + 0.3280(T_r)^{-3} - 0.07148(T_r)^{-4} \quad (7)$$

$$\alpha P_c = \alpha_1 \exp(-c_1 T_r) + \alpha_2 \{1 - \exp(-c_2 T_r^{-1/25})\} \quad (8)$$

$$b P_c = \alpha_3 (1 - c_3 T_r) \exp(-c_4 T_r) + \alpha_4 \{1 - (1 + 0.75 c_4 T_r^{-1/25})\} \exp(-c_5 T_r^{-1/25}) \quad (9)$$

که در آن‌ها  $T_r = T/T_c$ ،  $c_1 = 0.98635$ ،  $c_2 = 1.17728$ ،  $\alpha_1 = -0.05265$ ، و  $\alpha_2 = 1.00472$  با استفاده از این پارامترهای مجدداً مقیاس‌بندی شده براساس دمای بحرانی، خواص فشار-دما-حجم فلزات قلیایی و قلیایی خاکی مورد بررسی قرار گرفت.

$B_2$  ضریب دوم ویرال است که به وسیله‌ی تابع پتانسیل بین مولکولی قابل محاسبه است؛  $\alpha(T)$ ،  $b(T)$  دو پارامتر دیگر معادله‌ی حالت هستند که به نیروهای دافعه بین مولکولی بستگی دارند؛  $T$  دما،  $\rho$  چگالی،  $\sigma$  قطر مولکولی و  $kT$  انرژی گرمایی است؛  $\lambda$  مقدار ثابتی است که باید تعیین شود. با داشتن روابط وابسته به دما برای  $B_2$ ،  $\alpha(T)$ ،  $b(T)$  و یک نقطه‌ی تجربی برای فشار-دما-حجم، می‌توان  $\lambda$  را به دست آورد. پارامتر قابل تنظیم  $\lambda$  در معادله‌ی حالت، خطای موجود در ضریب دوم ویرال را تعدیل می‌کند و برای هر فلزی مقدار مشخصی است. ضریب دوم ویرال یک پارامتر اصلی برای مطالعه‌ی خواص ترمودینامیکی فلزات است، چرا که در دامنه‌ی وسیعی از دما اطلاعات تجربی و تابع پتانسیل دقیقی از آن‌ها وجود ندارد. لذا برای به دست آوردن ضریب دوم ویرال از اصل حالت‌های متناظر برای فلزهای قلیایی، استفاده شده است [۲۴].

### ۳. روابط همبستگی

همان‌طور که قبلاً اشاره شد با داشتن تابع پتانسیل مناسب، می‌توان پارامترهای وابسته به دمای معادله‌ی حالت را محاسبه کرد. در عمل، شکل درست پتانسیل بین مولکولی  $u(r)$  در دسترس نیست. اما  $B_2(T)$  را به طریق تجربی می‌توان به دست آورد و از طریق آن پارامترهای  $\alpha$  و  $b$  را که به جزئیات تابع پتانسیل حساس نیستند، با داشتن عمق چاه پتانسیل ( $\varepsilon$ ) و حداقل فاصله‌ی بین مولکولی ( $r_m$ ) به دست آورد [۲۴]. با داشتن داده‌های تجربی ضریب دوم ویرال، و یک مدل ساده از تابع پتانسیل، مانند لندارد-جونز<sup>(۹)</sup>، مقادیر  $\varepsilon$ ، و مقدار  $r_m$  قابل محاسبه‌اند [۱۱].

متغیرهای کاهیده<sup>(۱۰)</sup> مناسب می‌توانند با فرض داشتن  $B_2(T)$  و محاسبه‌ی پارامترهای  $\varepsilon$  و  $r_m$  با استفاده از برازش داده‌های ضریب دوم ویرال با بعضی مدل‌های پتانسیل  $u(r)$  در ناحیه‌ی دمای بویل تعیین شوند. مقدار  $\varepsilon$  و مقدار  $r_m$  به مدل پتانسیل خاصی که انتخاب شده است بستگی دارند اما مقدار دمای بویل ( $T_B$ )، حجم بویل ( $V_B$ )، و فشار بویل ( $P_B$ ) معرفی شده در زیر همیشه می‌توانند بازیابی شوند

$$B_2(T_B) = 0,$$

$$V_B = (T \frac{dB_2}{dT})_{T_B},$$

$$P_B = \frac{kT}{V_B}$$



#### ۴. نتایج و بحث

با استفاده از رابطه‌های ۷ تا ۹، پارامترهای وابسته به دما  $(\alpha(T))$ ،  $b(T)$  و  $B_2(T)$  معادله‌ی حالت در هر دمایی قابل محاسبه‌اند. دما و چگالی بحرانی از مرجع [۲۶] استخراج شده است. در ضمن مقادیر ثابت  $\lambda$  در جدول ۱ آورده شده است. با داشتن پارامترهای وابسته به دما و  $\lambda$  می‌توان با استفاده از رابطه‌ی (۱) خواص فشار-دما-حجم سیستم فلزی را محاسبه کرد. معادله‌ی حالت ISM در محدوده‌ی وسیعی از دما برای فلزات به کار گرفته شد. همان‌طور که گفته شد دو ثابت بحرانی (دما-چگالی) اطلاعات کلیدی در استفاده از رابطه‌ها هستند. نتایج کلی نشان داد که چگالی اشباع فلزات قلیایی و قلیایی خاکی مذاب، به وسیله‌ی این معادله‌ی حالت به خوبی قابل محاسبه است.

در جدول ۲، مقدار خطا در اندازه‌گیری چگالی مایع عنصر پتاسیم در محدوده‌ی دمایی ۵۵۰-۲۰۰۰ کلوین و فشار ۰/۰۰۰۲-۹۴/۲ بار نشان داده شده است. مقدار مطلق میانگین خطا برای پتاسیم ۵/۴۱ درصد است. این معادله‌ی حالت، چگالی پتاسیم را در محدوده‌ی وسیعی از دما به خوبی محاسبه می‌کند. در جدول ۳، مقدار مطلق میانگین خطا برای استرانسیم (از عناصر گروه قلیایی خاکی)، ۰/۳۳ درصد است. در جدول ۴، کلیه‌ی نتایج برای تمام عناصر قلیایی و قلیایی خاکی گزارش شده است. با توجه به مقدار گزارش شده هم‌خوانی بسیار خوبی بین این روش و مقدار تجربی مشاهده می‌شود.

برای بررسی معادله‌های همبستگی ارائه شده با دو مقیاس دما و چگالی بحرانی  $(\rho_c, T_c)$ ، این روش با کارهای دیگر در این زمینه مقایسه شد. قطعی و بوشهری [۱۵، ۱۶] در رابطه‌های خود از آنتالپی تبخیر و چگالی در نقطه‌ی سه گانه  $(\rho_{tr}, \Delta H_{tr})$  و نیز از کشش سطحی و چگالی در نقطه‌ی انجماد به عنوان مقیاس استفاده کردند. روش آن‌ها و روش مورد بحث با استفاده از معادله‌ی حالت ISM برای عنصر سدیم در جدول ۵ مقایسه شده‌اند. از جدول ۵، دیده می‌شود که روش مورد بحث مقاله در بیشتر دماها از دو روش دیگر خطای به مراتب کم‌تری دارد. برای تمام عناصر قلیایی و قلیایی خاکی، روش مورد بحث مقاله با دو روش دیگر در جدول ۶ مقایسه شده‌اند. در محدوده‌ی دمایی ۴۵۰-۲۲۰۰ کلوین، نتایج بسیار خوبی مشاهده می‌شود (جدول ۶).

#### جدول ۱. پارامترهای ثابت به کار رفته برای فلزات قلیایی و قلیایی خاکی

فلز	$P_c$ (mol/L <sup>-1</sup> )	$T_c$ (K)	$P_c$ (بار)	$\lambda$
Li	۱۸،۱۵۵	۳۷۰۰	۶۰۰	۰/۳۶۹
Na	۷،۸۲۹	۲۵۰۰	۲۵۶	۰/۳۲۶
K	۴،۰۹۲	۲۲۸۰	۱۶۴	۰/۳۶۹
Rb	۴،۰۹۴	۲۱۱۰	۱۳۲	۰/۳۸۰
Cs	۳،۲۳۵	۲۰۴۳	۱۱۷	۰/۳۹۳
Ba	۶،۴۰۱	۴۴۰۰	۷۷۰	۰/۳۵۹
Mg	۱۶،۹۱۰	۳۶۵۰	۱۷۰۰	۰/۳۶۷
Ca	۹،۰۵۰	۴۲۸۰	۱۰۶۰	۰/۳۷۳
Sr	۷،۰۵۳	۴۰۰۰	۷۸۰	۰/۳۵۱

#### جدول ۲. مقدار مطلق خطای میانگین محاسبه شده برای چگالی مایع اشباع

پتاسیم در مقایسه با داده‌های تجربی

T (K)	P (بار)	$\rho$ تجربی (mol L <sup>-1</sup> )	$\rho$ محاسبه شده (mol L <sup>-1</sup> )	انحراف %
۵۵۰	۰/۰۰۰۲	۱۹،۹۹۸	۱۸،۹۶۳	۴/۷۰
۶۰۰	۰/۰۰۰۹	۱۹،۶۱۶	۱۹،۱۳۸	۲/۴۴
۶۵۰	۰/۰۰۳۴	۱۹،۳۰۹	۱۹،۳۰۲	۰/۰۴
۷۰۰	۰/۰۰۱۰	۱۹،۰۰۳	۱۹،۴۵۵	-۲/۳۸
۷۵۰	۰/۰۰۲۷	۱۸،۶۹۶	۱۹،۵۹۹	-۴/۸۳
۸۰۰	۰/۰۰۶۱	۱۸،۴۱۴	۱۷،۴۰۹	۵/۴۶
۸۵۰	۰/۰۱۲۷۴	۱۸،۱۰۷	۱۷،۲۵۴	۴/۷۱
۹۰۰	۰/۰۲۴۴۱	۱۷،۸۰۱	۱۷،۰۹۱	۳/۹۸
۹۵۰	۰/۰۴۳۶	۱۷،۴۹۴	۱۶،۹۲۳	۳/۲۶
۱۰۰۰	۰/۰۷۳۲	۱۷،۱۸۷	۱۶،۷۴۸	۲/۵۶
۱۱۰۰	۱/۸۶۴	۱۶،۵۴۷	۱۶،۳۲۹	۱/۰۲
۱۲۰۰	۳/۹۱۳	۱۵،۹۳۴	۱۵،۹۸۶	-۰/۳۳
۱۲۵۰	۵/۴۱۵	۱۵،۶۵۲	۱۵،۷۷۹	-۰/۸۱
۱۳۰۰	۷/۳۰۴	۱۵،۲۹۴	۱۵،۵۶۶	-۱/۷۸
۱۳۵۰	۹/۶۲۸	۱۴،۹۸۷	۱۵،۳۴۶	-۲/۴۰
۱۴۰۰	۱۲/۴۴۰	۱۴،۶۸۰	۱۵،۱۱۹	-۲/۹۹
۱۵۰۰	۱۹/۶۰۰	۱۳،۸۸۷	۱۴،۶۴۳	-۵/۴۴
۱۶۰۰	۲۹/۳۰۰	۱۳،۰۶۹	۱۴،۱۳۵	-۸/۱۶
۱۷۰۰	۴۱/۶۰۰	۱۲،۲۷۶	۱۳،۵۹۲	-۱۰/۷۲
۱۸۰۰	۵۶/۵۰۰	۱۱،۴۰۷	۱۳،۰۰۸	-۱۴/۰۳
۱۹۰۰	۷۴/۰۰۰	۱۰،۳۸۴	۱۲،۳۷۵	-۱۹/۱۷
۲۰۰۰	۹۴/۲۰۰	۹،۲۳۳	۱۱،۶۸۰	-۲۶/۵۱
				AAD% <sup>a</sup>
				۵/۴۱

$$a \text{ AAD\%} = (1/N) \sum |(\rho - \rho_{\text{تجربی}}) / \rho_{\text{تجربی}}| \times 100$$

#### جدول ۳. متوسط خطای محاسبه شده برای چگالی مایع اشباع استرانسیم در

مقایسه با داده‌های تجربی

T (K)	P (بار)	$\rho$ تجربی (mol L <sup>-1</sup> )	$\rho$ محاسبه شده (mol L <sup>-1</sup> )	انحراف %
۱۰۴۱	۰/۰۲۵۰	۲۶،۸۱۰	۲۶،۸۷۵	-۰/۲۴
۱۱۰۰	۰/۰۶۰۷	۲۶،۷۹۰	۲۶،۷۷۶	۵/۳۸
۱۲۰۰	۰/۰۲۲۰	۲۶،۶۷۰	۲۶،۵۷۶	۰/۳۵
۱۳۰۰	۰/۰۶۴۹	۲۶،۶۶۰	۲۶،۳۴۸	۰/۴۲
۱۴۰۰	۰/۱۶۲۱	۲۶،۱۹۰	۲۶،۱۰۱	۰/۳۴
۱۵۰۰	۰/۳۵۵۴	۲۵،۸۸۰	۲۵،۸۳۷	۰/۱۷
۱۶۰۰	۰/۷۰۱۰	۲۵،۵۵۰	۲۵،۵۶۰	-۴/۱۱
۱۷۰۰	۱/۲۶۷۰	۲۵،۲۱۰	۲۵،۲۷۲	-۰/۲۵
۱۸۰۰	۲/۱۳۳۰	۲۴،۸۶۰	۲۴،۹۷۱	-۰/۴۵
۱۹۰۰	۲/۳۸۱۰	۲۴،۵۱۰	۲۴،۶۵۹	-۰/۶۱
۲۰۰۰	۵/۰۹۰۰	۲۴،۱۶۰	۲۴،۳۳۶	-۰/۷۳
				AAD%
				۰/۳۳



با توجه به نتایج به دست آمده (جدول‌های ۲ تا ۶)، چگالی حالت اشباع محاسبه شده با معادله‌ی حالت ISM در مقایسه با داده‌های تجربی، بسیار مطلوب است. جدول‌های ۵ و ۶ کار حاضر را با کارهای دیگران مقایسه می‌کنند. از این مقایسه، مشخص می‌شود که پارامترهای وابسته به دمای معادله‌ی حالت  $(\alpha(T), b(T), B_2(T))$  با استفاده از ثابت‌های بحرانی دما و چگالی نتایج مناسب‌تری در گستره‌ی وسیع‌تری از دما و فشار ارائه می‌دهند.

کار حاضر نشان داد که با ارائه‌ی پارامترهای وابسته به دما می‌توان از معادله‌ی حالت ISM برای فلزات قلیایی و قلیایی خاکی استفاده نمود. برای به دست آوردن پارامترهای وابسته به دما، نیازی به استفاده از تابع پتانسیل نیست و با اطلاعات محدودی می‌توان آن‌ها را محاسبه کرد. محاسبات انجام شده کارآیی این روش ساده در محاسبه‌ی خواص فشار-دما-حجم فلزات قلیایی و قلیایی خاکی را نشان داد.

### پی‌نوشت‌ها:

۱. Perturbation Theory
۲. Hard Sphere
۳. Second Virial Coefficients
۴. Scaling Factor
۵. Corresponding States Correlation
۶. Latent Heat of Vaporization
۷. Triple Point
۸. Refractory Metals
۹. Lennard-Jones
۱۰. Reduced Variable
۱۱. Universal Function

**جدول ۴.** متوسط خطای محاسبه شده برای چگالی مایع فلزات قلیایی و قلیایی خاکی در محدوده‌ی وسیعی از دما

فلز	$\Delta T(K)$	AAD%
Li	۲۲۰۰-۶۰۰	۵,۱۷
Na	۲۲۰۰-۶۰۰	۵,۶۹
K	۲۰۰۰-۵۵۰	۵,۴۱
Cs	۱۸۰۰-۵۰۰	۵,۹۲
Rb	۲۰۰۰-۴۵۰	۵,۴۴
Ba	۲۰۰۰-۱۰۰۰	۰,۴۴
Mg	۲۰۰۰-۹۲۳	۱,۴۹
Ca	۲۰۰۰-۱۱۱۴	۱,۷۳
Sr	۲۰۰۰-۱۰۴۱	۰,۳۳

**جدول ۵.** متوسط خطای محاسبه شده برای چگالی سدیم در مقایسه با دیگر کارهای مشابه [۱۹، ۱۶]

T (K)	P (بار)	[۱۹]	[۱۶]	کار حاضر
۶۰۰	۰,۰۰۰۵	۰,۱۱	۲,۲۸	۱۰,۷۱
۷۰۰	۰,۰۰۱۱	-۱,۹۳	۱,۰۴	۶,۶۷
۸۰۰	۰,۰۰۹۵	-۳,۵۱	-۱,۴۰	۲,۵۸
۹۰۰	۰,۰۵۱۵	-۴,۳	-۳,۰۰	-۱,۶۰
۱۰۰۰	۰,۱۹۸۶	-۴,۵۴	-۴,۵۰	-۵,۷۹
۱۱۰۰	۰,۵۹۶۵	-۴,۲۳	-۵,۹۰	۸,۵۸
۱۲۰۰	۱,۵۰۴	-۳,۰۶	-۷,۳۰	۷,۴۲
۱۳۰۰	۳,۲۱۶	-۱,۳۴	-۹,۰۰	۶,۲۹
۱۴۰۰	۶,۲۵۶	۱,۴۱	-۱۱,۰۰	۵,۱۵
۱۵۰۰	۱۱,۱۳	۵,۴۴	-۱۳,۰۰	۳,۲۶
۱۶۰۰	۱۸,۲۸	۱۱,۸۹	-۱۵,۰۰	۱,۷۶
۱۷۰۰	۲۸,۲۸	۲۵,۱۲	-۱۸,۰۰	-۰,۰۴
۱۸۰۰	۴۱,۶۱	-۲۸,۳۷	-۲۱,۰۰	-۱,۸۷
۱۹۰۰	۵۸,۷۰	-۳۳,۱۷	-۲۵,۰۰	-۴,۰۸
۲۰۰۰	۷۹,۹۱	-۴۷,۲	-۳۰,۰۰	-۶,۷۵
۲۱۰۰	۱۰۵,۵	-۵۴,۱	-۳۶,۰۰	-۹,۹۷
۲۲۰۰	۱۳۵,۷	-۶۵,۴	-۴۳,۰۰	-۱۴,۱۲
				AAD%
				۵,۶۹

**جدول ۶.** مقایسه‌ی خطاهای محاسبه شده در چارچوب کار حاضر با کارهای دیگران برای فلزات قلیایی و قلیایی خاکی

فلز	$\Delta T$	[۱۷]	[۱۹]	[۱۶]	[کار حاضر]
Li	۲۲۰۰-۶۰۰		۳,۲۲	۵,۸۵	۳,۸۹
Na	۲۲۰۰-۶۰۰		۱۷,۳۶	۱۴,۱۷	۵,۶۹
K	۲۰۰۰-۵۵۰		۱۳,۷۷	۱۵,۶۱	۵,۴۱
Rb	۲۰۰۰-۴۵۰		۱۷,۹۲	۲۷,۷۴	۵,۴۵
Cs	۱۸۰۰-۵۰۰		۲۴,۶۰	۱۷,۵۶	۵,۹۲
Ba	۲۰۰۰-۱۰۰۰	۳,۱۸			۰,۴۵
Mg	۲۰۰۰-۹۲۳	۱,۹۷			۱,۴۹
Ca	۲۰۰۰-۱۱۱۴	۱,۱۷			۱,۷۴
Sr	۲۰۰۰-۱۰۴۱	۳,۲۲			۰,۳۳



## مرجع‌ها:

1. R. D. Kale, M. Rajan, Developments in sodium technology, *Curr. Sci.* 86 (2004) 668-675.
2. M. H. Mousazadeh, Corresponding states theory and thermodynamic properties of liquid alkali metals, *J. Iranian Chem. Soc.*, 3 (2006) 22-31.
3. M. H. Mousazadeh, A perturbed Lennard-Jones chain equation of state for liquid Metals, *J. Phys.: Condensed Matter*, 18 (2006) 4793-4800.
4. M. H. Mousazadeh, A perturbed Lennard-Jones chain equation of state for liquid refractory metals, *J. Non-Crystalline Solids*, 353 (2007) 435-439.
5. M. H. Mousazadeh, Equation of state for thermodynamic properties of pure and Mixtures liquid alkali metals, *Thermochimica Acta*, 511 (2010) 147-151.
6. M. H. Mousazadeh, H. Diarmand, A perturbed Yukawa chain equation of state for liquid metals, *J. of Mol. Liquids*, 170 (2012) 41-44.
7. Y. S. Wei, R. J. Sadus, *Am. Inst. Chem. Eng. J.* 46 (2000) 169-196.
8. J. A. Barker, D. Henderson, *J. Chem. Phys.* 47 (1967) 4714-4721.
9. N. F. Carnahan, K. E. Starling, *J. Chem. Phys.* 51 (1969) 635-636.
10. Y. Song, E. A. Mason, Statistical mechanical theory of a new analytical.
11. G. Ihm, Y. Song, E. A. Mason, A new principle of corresponding states for nonpolar fluids, *J. Chem. Phys.* 94 (1991) 3839-3848.
12. A. Boushehri, M. H. Keshavarz, The liquid density of complex liquid mixtures, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 67 (1994) 1213-1216.
13. M. H. Mousazadeh, A. Boushehri, Equation of state for complex liquid mixtures from surface tension, *Int. J. Thermophys.* 17 (1996) 945-957.
14. M. H. Mousazadeh, A. Boushehri, A correlation of densities of liquid natural gas mixtures from surface tension, *Fluid Phase Equilib.* 168 (2000) 125-134.
15. M. M. Ghatee, A. Boushehri, An analytical equation of state for molten alkali metals, *Int. J. Thermophys.* 16 (1995) 1429-1438.
16. M. M. Ghatee, A. Boushehri, Equation of state for compressed liquids from surface tension, *Int. J. Thermophys.* 17 (1996) 945-957.
17. F. M. Tao, E. A. Mason, Equation of state for mixtures of nonpolar fluids, *Int. J. Thermophys.* 13 (1992) 1053-60.
18. K. S. Pitzer, R. F. Curl Jr, The volumetric and thermodynamics properties of fluids, *J. Am. Chem. Soc.* 79 (1957) 2369-70.
19. A. Boushehri, E. A. Mason, Equation of state for compressed liquids and their mixtures from the cohesive energy density, *Int. J. Thermophys.* 14 (1993) 685-697.
20. H. Karimi, F. Yousefi, M. M. Papari, PVTx Properties of liquefied Natural Gas Mixtures Using Tao-Mason Equation of state, *J. Chem. Eng. Japan* 44 (2011) 295-303.
21. M. M. Papari, M. Kiani, R. Behjatmanesh-Ardakani, J. Moghadasi, A. Campo, Equation of state and P-V-T properties of polymer melts based on glass transition data, *Journal of Molecular Liquids* 16 (2011) 148-152.
22. F. Yousefi, M. Kaveh, Tao-Mason equation of state for refractory metals, *Indian J. Sci. & Tech.* 5 (2012) 2363-68.
23. F. Yousefi, H. Karimi, Modification of Tao-Mason equation of state to Ionic liquids, *Ionics*. (2011) DOI.10.1007/s11581-011-0605-8.
24. C. Tsionopoulos, J. L. Heidman, From the virial to the cubic equation of state, *Fluid Phase Equilib.* 57 (2003) 261-276.
25. Y. Song, E. A. Mason, Statistical mechanical basis for accurate analytical equation of state for fluids, *Fluid Phase Equilib.* 75 (1992) 105-115.
26. N. B. Vargaftik, *Handbook of Physical Properties of Liquids and Gases*, Hemisphere, Washington, DC (1975).