

پیش‌بینی عدد کئوردیناسیون سطح فلزهای مذاب

انسیه قاسمیان لمراسکی*⁺، حدیث پرهیز

دانشکده علوم پایه، دانشگاه ایلام، ایلام، ایران

چکیده: در این پژوهش کشش سطحی و عدد کئوردیناسیون سطح فلزهای مذاب با استفاده از معادله استفان محاسبه و گزارش شده است. پارامترهایی مانند آنتالپی تصعید، چگالی و کشش سطحی از جمله مهم‌ترین پارامترهای مورد نیاز هستند. در پیش‌بینی کشش سطحی فلزهای مذاب، فرضیه‌هایی هم‌چون تغییرهای بسیار جزئی حجم در لحظه ذوب، شبیه بودن ساختار بلوری مایع و جامد در نقطه ذوب، در نظر گرفتن آنتروپی فزونی سطح، و صرف‌نظر از برهمکنش ذره با ذره‌ها در لایه‌های دوم و سوم از سطح در نظر گرفته شد. نتیجه‌ها نشان داد که عدد کئوردیناسیون سطح فلزهای مذاب کسری بین ۰/۷-۰/۳ از عدد کئوردیناسیون توده است. وابسته بودن عدد کئوردیناسیون سطح به پارامترهای گوناگون در معادله استفان، مانند دما، حجم و یکسان نبودن شرایط محاسبه از جمله دما امکان مقایسه اعداد کئوردیناسیون سطح فلزهای گزارش شده در مراجع و پژوهش حاضر را دشوار ساخته است. در ادامه پژوهش از معادله‌های گوناگونی به منظور همبسته نمودن عدد کئوردیناسیون استفاده شد و پارامترهای تنظیم‌پذیر محاسبه و معرفی شده‌اند.

واژه‌های کلیدی: فلز مذاب؛ عدد کئوردیناسیون سطح؛ کشش سطحی؛ آنتالپی تصعید.

KEYWORDS: Molten metal; Surface coordination number; Surface tension; Enthalpy of sublimation.

مقدمه

وجود یک لایه هر چند نازک به نام سطح در مایع‌ها و جامدها و رفتار متفاوت آن نسبت به توده موجب شده است تا سطح به عنوان شاخه مجزایی در دانش‌هایی همچون شیمی، فیزیک، مواد و مکانیک رشد پیدا کرده و اهمیت زیادی در مطالعه‌های پژوهشی و صنعتی پیدا کند. در بین روش‌های بسیار و گوناگونی که برای مطالعه ویژگی‌های سطح مایع‌ها وجود دارد، کشش سطحی خاصیت شیمی فیزیکی مهمی است که ویژگی‌های بسیار جالب سطح در آن نمایانگر می‌شود. از سویی دیگر برتری‌های همچون سادگی و دقت کشش سطحی نسبت به سایر روش‌ها و ارایه اطلاعات مفید و سازنده برای تعیین ساختار، برهمکنش و نیروهای بین ملکولی چه در سطح و چه در توده حلال یا محلول

موجب شده تا کشش سطحی کاربرد گسترده‌ای از نقطه نظر علمی به خود اختصاص دهد [۵-۱]. فلزها در حالت مایع و بخار، ساختار پیچیده‌ای دارند. اطلاعات مرتبط با ویژگی‌های ترمودینامیکی این گروه از عناصر از اهمیت به سزایی برخوردار است. کشش سطحی فلزهای مذاب خالص و مخلوط در مطالعه ساختار و برهمکنش بین ملکولی چه در سطح و چه در توده کاربرد زیادی داشته که می‌توان به برآورد میزان غیر ایده‌آل بودن محلول‌ها و تعیین درصد خلوص اشاره کرد. از سوی دیگر اطلاعات اساسی درباره ساختار و انرژی سطح در فرایندهایی همچون لحیم کاری، سینترینگ، تشکیل شیشه و جداسازی از جایگاه ویژه‌ای برخوردار بوده به طوری که می‌توان گفت: معلوم بودن

*E-mail: eghasemian@ymail.com

*عهده دار مکاتبات

در این مقاله سعی شده است تا با ارایه راهکاری مناسب برای دستیابی به نسبت و رابطه به دست آمده بین عدد کئوردیناسیون توده و سطح نتیجه را به سایر سامانه‌ها و فلزهای گوناگون گسترش داده و در محاسبه‌های مربوط به کشش سطحی و سایر پارامترهای فیزیکی و ترمودینامیکی از آن استفاده شود.

نتیجه‌های به دست آمده تطابق خوبی با موردهای همانند گزارش شده داراست. هر چند متفاوت بودن شرایط محیطی امکان مقایسه کامل نتیجه‌ها گزارش شده در مراجع و مقادیرهای محاسبه شده در این پژوهش را سخت نموده است. با این حال نزدیک بودن مقادیرهای کشش سطحی با کشش سطحی تجربی گزارش شده در مقاله‌ها بیانگر درستی روش به کار برده دارد. بی شک پیشنهاد ارایه شده در این پژوهش در کنار سایر روش‌های پیشنهادی در مقاله‌ها دستیابی به مقادیرهای عددهای کئوردیناسیون سطح را آسان‌تر خواهد ساخت. در قسمت دوم و پایانی این پژوهش سعی شده است تا معادله‌های گوناگونی به منظور همبسته نمودن عدد کئوردیناسیون سطح و پارامترهایی مانند آنتالپی، چگالی و کشش سطحی معرفی و به کار گرفته شود.

بخش نظری

یکی از مهم‌ترین معادله‌هایی که پارامترهای کلیدی و مهمی مانند کشش سطحی و آنتالپی تبخیر را به هم مرتبط می‌سازد معادله استفان است که به صورت زیر ارایه شده است [۱۸، ۱۹]:

$$\sigma = \frac{\Delta_{\text{vap}} H_m^{\circ} Z_s}{V^{\frac{2}{3}} \cdot N_A^{\frac{1}{3}} Z} \quad (1)$$

در این معادله σ کشش سطحی، $\Delta_{\text{vap}} H_m^{\circ}$ آنتالپی تبخیر استاندارد مولی، V حجم، N_A عدد آووگادرو، Z_s و Z به ترتیب عدد کئوردیناسیون سطح و توده هستند. از آنجا که عدد کئوردیناسیون سطح و توده مایع‌ها به سادگی قابل محاسبه نیستند صورت‌های خطی گوناگونی از معادله استفان تا کنون معرفی شده است تا نیاز به محاسبه عدد کئوردیناسیون سطح و توده را برآورده سازد [۱۸، ۱۹]. در کار حاضر تلاش شده است تا با در اختیار گرفتن پارامترهایی مانند آنتالپی تبخیر، کشش سطحی، چگالی، و عدد کئوردیناسیون توده به محاسبه عدد کئوردیناسیون سطح فلزها پرداخته شود. به منظور محاسبه عدد کئوردیناسیون سطح مقادیرهای آنتالپی تبخیر، حجم مولی یا چگالی، و عدد کئوردیناسیون توده از منابع استخراج

مقدارهای کشش سطحی و تغییر آن با ترکیب و شرایط گوناگون، اطلاعات گوناگون و سازنده‌ای را برای پژوهشگر فراهم می‌آورد [۸-۶].

روش‌های نظری از دیرباز همراه با روش‌های تجربی به تعیین پارامترهای سطحی پرداخته و گسترش زیادی یافته‌اند. این روش‌ها به خاطر صرفه‌جویی در مواد، زمان و در اختیار گذاشتن اطلاعاتی که به سادگی به روش تجربی دست یافتنی نیست، اهمیت به‌سزایی در گسترش علم دارند. پارامترهای سطحی نیز از این قاعده مستثنی نیستند. این روش‌ها که به منظور پیش‌بینی پارامترهای سطحی فلزهای مذاب به کار رفته‌اند را می‌توان به دو دسته اساسی تقسیم‌بندی نمود. دسته اول شامل روش‌هایی است که پارامترهای اصلی سطح فلزهای مذاب را پیش‌بینی کرده و دسته دوم شامل روش‌هایی است که با محاسبه بعضی از ویژگی‌ها به شناخت ویژگی‌های سطحی فلزهای مذاب کمک می‌کنند [۹]. از مهم‌ترین روش‌های نظری که به منظور پیش‌بینی ویژگی‌های سطحی فلزهای مذاب به کار برده شده است می‌توان به روش آماری پتانسیل چاه مربعی^(۱) و مدل‌های وابسته به آن [۱۰]، نظریه اختلال [۱۱]، شبیه سازی مونت کارلو [۱۳، ۱۲]، و روش‌های نیمه تجربی [۱۶-۱۴] اشاره نمود. در این پژوهش عدد کئوردیناسیون سطح دسته‌ای از فلزهای مذاب با استفاده از معادله استفان پیش‌بینی و مورد بحث و بررسی قرار گرفته است. در بین پژوهش‌ها و مقاله‌هایی که تاکنون انجام شده تعداد انگشت شماری به محاسبه عدد کئوردیناسیون سطح پرداخته‌اند.

پارامترهای فیزیکی مهمی مانند آنتالپی تبخیر، کشش سطحی، انرژی سطح و آنتالپی تصعید به عدد کئوردیناسیون سطح وابسته هستند [۱۷]. در مطالعه دینامیکی ساختار فلزهای مذاب و آلیاژها دستیابی به مقادیرهای عدد کئوردیناسیون در پیش‌بینی ویژگی‌هایی همچون گرانروی، ضریب نفوذ، فعالیت و هسته‌زایی از اهمیت بالایی برخوردار است. افزون بر این به تازگی مطالعه‌هایی به منظور همبسته نمودن اعداد کئوردیناسیون با اندازه، بار الکتریکی، شکل و ساختار نانوذره‌ها نیز ارایه شده است [۱۷]. از این رو با توجه به اهمیت و کاربرد گسترده فلزها، آلیاژها و کمپلکس‌های فلزی مطالعه عدد کئوردیناسیون اهمیت به‌سزایی در راستای دستیابی به ویژگی‌های ساختاری این دسته از ترکیب‌ها دارد. افزون بر این مطالعه رفتار و ویژگی‌های سطحی نانوذره‌ها با توجه به کاربرد روزافزون در پژوهش‌ها و صنعت دارای اهمیت زیادی بوده و محاسبه عدد کئوردیناسیون سطح خالی از این مستثنی نیست.

$$\rho_L(T) = \rho_L(T_m) + \left(\frac{d\rho_L}{dT} \right) (T - T_m) \quad (9)$$

با قرار دادن معادله (۷) در معادله (۲) معادله جدیدی برای کشش سطحی به دست خواهد آمد.

$$\gamma_{iv}(T) = \left(\frac{m\Delta_{\text{vap}}H_m^\circ - TS}{fN_a^{1/r}} \right) \left(\frac{\rho_L(T)}{M} \right)^{1/r} \quad (10)$$

یا

$$\frac{\gamma_{iv}(T)}{\gamma_{iv}(T_m)} = \left(1 + p - p \frac{T}{T_m} \right) \left(1 - p + p \frac{T}{T_m} \right)^{1/r} \quad (11)$$

در حالی که

$$p = \frac{1}{\left[m \frac{\Delta_{\text{vap}}H_m^\circ}{TS_m} - 1 \right]}, \quad q = \left(\frac{d\rho_L}{dT} \right) \left[\frac{T_m}{\rho_L(T_m)} \right] \quad (12)$$

بدین ترتیب با استفاده از معادله (۱۰) کشش سطحی فلزهای مذاب قابل محاسبه خواهد بود.

نتیجه‌ها و بحث

مقدارهای محاسبه شده کشش سطحی $\gamma_{iv}(T)$ ، آنتالپی تبخیر $\Delta_{\text{vap}}H_m^\circ$ ، آنتروپی فزونی سطح s ، چگالی ρ_L ۲۱ فلز مذاب در دمای ذکر شده در جدول ۱ آورده شده است. مقدارهای محاسبه نشده کشش سطحی و کاهش آن نسبت به کشش سطحی در دمای ذوب بیانگر دقت و کارایی معادله‌های به کار گرفته شده است. پارامترهای ضریب دمایی چگالی $(d\rho_L/dT)$ ، کشش سطحی فلزهای مذاب در دمای ذوب $\gamma_{iv}(T_m)$ ، دمای ذوب T_m از مراجع گردآوری شده است [۲۰].

محاسبه عدد کئوردیناسیون سطح

جدول ۲ مقدارهای عدد کئوردیناسیون سطح محاسبه شده از معادله (۱) را نشان می‌دهد. مقدارهای عدد کئوردیناسیون سطح در این پژوهش در بازه‌ی ۸-۳ بوده در حالی که برای فلزهای مایع با ساختار مکعب مرکز وجه $Z_s = 6$ ، برای فلزهای مذاب سرب، طلا، نقره، سدیم، جیوه، پلاتین، آنتیموان، بیسموت، و قلع مقدار $Z_s = 9$ در مراجع گزارش شده است [۱۵]. در برخی از مقاله‌های یاد شده صرف نظر از ماهیت فلز و با توجه به نوع ساختار بلوری

استفاده شده است [۲۰]. همچنین به منظور محاسبه کشش سطحی در دماهای مورد نظر از معادله لو و همکاران استفاده شده است [۲۰].

محاسبه کشش سطحی

در سال ۲۰۰۵ میلادی لو و همکاران معادله‌ای به منظور پیش‌بینی کشش سطحی فلزهای مذاب بر اساس فرضیه‌هایی مانند تغییرهای بسیار جزئی حجم در لحظه ذوب، شبیه بودن ساختار بلوری مایع و جامد در نقطه ذوب، در نظر گرفتن آنتروپی فزونی سطح، و با صرفه نظر از برهمکنش ذره با ذره‌ها در لایه‌های دوم و سوم از سطح مطابق معادله (۲) ارائه کردند:

$$\gamma_{iv}(T) = \left[m\Delta_{\text{vap}}H_m^\circ - TS(T) \right] / \left[N_a A_L(T) \right] \quad (2)$$

$$m = \left(2 - k_1 - k_1^{1/r} \right) / 2 \quad (3)$$

در معادله (۲) $\gamma_{iv}(T)$ کشش سطحی مایع - بخار، $\Delta_{\text{vap}}H_m^\circ$ آنتالپی تبخیر، $S(T)$ آنتروپی فزونی سطح، T دما، N_a عدد آووگادرو، $A_L(T)$ مساحت سطح در دمای T و $k_1 = 3/4$ می‌باشد. با تعریف پارامتر $A_L(T)$ به صورت معادله (۴)

$$A_L = \lambda^{1/r} h^{1/r} / 3 \quad (4)$$

و در صورتی که h (قطر اتمی) به شکل زیر تعریف شود:

$$h = \left(\frac{6\eta V}{\pi} \right)^{1/r} \quad (5)$$

حجم با استفاده از جرم اتمی، و چگالی از معادله (۶) قابل محاسبه خواهد بود.

$$V = M / \left[N_a \rho(T) \right] \quad (6)$$

سپس با قراردادن معادله‌های (۵) و (۶) در معادله (۴) عبارت جدیدی برای $A_L(T)$ به دست خواهد آمد:

$$A_L(T) = f \left\{ M / \left[N_a \rho(T) \right] \right\}^{1/r} \quad (7)$$

در رابطه (۷)

$$f = \left(\frac{1}{\lambda^{1/r}} \right) \left(\frac{6\eta}{\pi} \right)^{1/r} \quad (8)$$

جدول ۱- مقادارها و پارامترهای محاسبه شده با استفاده از معادله‌ها (۹) تا (۱۲).

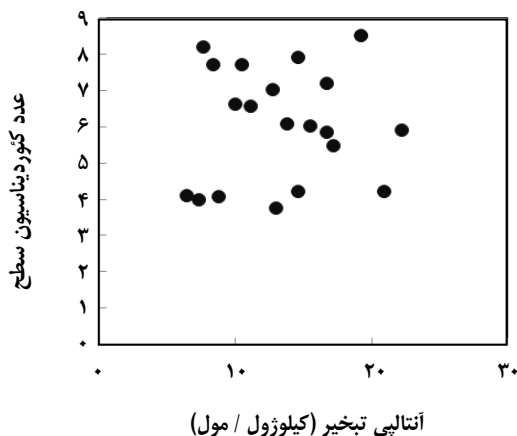
فلز	کشش سطحی در دمای ذوب	دمای ذوب (کلونین)	آنتالپی تبخیر (کیلوژول/مول)	دما محاسبه (کلونین)	چگالی (گرم/مترمکعب)	تغییرات چگالی با دما گرم/مترمکعب.کلونین	انتروپی (ژول/مول. کلونین)	پارامتر	کشش سطحی در دمای محاسبه
Ag	۹۲۵	۱۲۳۴	۲۵۵	۱۲۷۳	۹۳۴۶	۰٫۹۱	۵٫۳۰	-۰٫۱۲	۹۲۰٫۰
Al	۱۰۳۱	۹۳۳	۲۸۳	۹۴۳	۲۳۸۵	-۰٫۲۸	۵٫۳۰	-۰٫۱۱	۱۰۲۹
Au	۱۲۱۱	۱۳۳۸	۳۳۰	۱۴۲۳	۱۷۳۶۰	-۱٫۵۰	۵٫۳۰	-۰٫۱۲	۱۲۰۰
Ba	۲۳۱	۱۰۰۰	۱۵۰	۱۰۰۳	۳۳۲۱	-۰٫۵۳	۵٫۳۰	-۰٫۱۶	۲۳۱
Ca	۳۲۸	۱۱۱۵	۱۶۴	۱۱۲۳	۱۳۶۵	-۰٫۲۲	۵٫۳۰	-۰٫۱۸	۳۲۷
Cd	۳۰۵	۵۹۴	۱۰۰	۶۲۳	۸۰۲۰	-۱٫۱۶	۵٫۳۰	-۰٫۰۹	۳۰۱
Ce	۸۴۵	۱۰۶۸	۳۵۰	۱۱۴۳	۶۶۸۵	-۰٫۲۳	۵٫۳۰	-۰٫۰۴	۷۷۷
Co	۱۷۷۹	۱۷۶۸	۳۷۵	۱۸۲۳	۷۷۶۰	-۰٫۹۹	۵٫۳۰	-۰٫۲۳	۱۷۶۷
Cr	۱۵۸۲	۲۱۸۰	۳۳۹	۲۱۷۳	۶۲۸۰	-۰٫۳۰	۵٫۳۰	-۰٫۱۰	۱۵۸۳
Cu	۱۳۵۲	۱۳۵۸	۳۰۰	۱۴۲۳	۸۰۰۰	-۰٫۸۰	۵٫۳۰	-۰٫۱۴	۱۳۴۱
Fe	۱۶۵۰	۱۸۱۱	۳۵۵	۱۸۲۳	۷۰۱۵	-۰٫۸۸	۵٫۳۰	-۰٫۲۳	۱۶۴۸
La	۹۰۱	۱۱۹۳	۴۰۰	۱۲۴۳	۵۹۵۵	-۰٫۲۴	۵٫۳۰	-۰٫۰۵	۸۹۸
Mg	۳۵۹	۹۲۳	۱۲۸	۹۵۳	۱۵۹۰	-۰٫۲۷	۵٫۳۰	-۰٫۱۵	۳۵۶
Mn	۹۸۶	۱۵۱۹	۲۲۶	۱۵۳۳	۵۷۳۰	-۰٫۷۰	۵٫۳۰	-۰٫۱۹	۹۸۴
Na	۲۱۵	۳۷۱	۹۸	۳۷۸	۹۲۷	-۰٫۲۴	۵٫۳۰	-۰٫۰۹	۲۱۴
Ni	۱۸۱۰	۱۷۲۸	۳۷۸	۱۷۷۳	۷۹۰۵	-۱٫۱۶	۵٫۳۰	-۰٫۲۵	۱۷۹۹
Pb	۴۶۶	۶۰۱	۳۸۰	۶۱۳	۱۰۶۷۸	-۱٫۳۲	۵٫۳۰	-۰٫۰۷	۴۶۵
Pd	۱۴۶۷	۱۸۲۸	۱۷۸	۱۸۵۳	۱۰۴۹۰	-۱٫۲۷	۵٫۳۰	-۰٫۲۲	۱۴۶۲
Pt	۱۸۹۶	۲۰۴۵	۴۹۰	۲۰۵۳	۱۹۰۰۰	-۲٫۹۰	۵٫۳۰	-۰٫۳۱	۱۸۹۴
Sr	۲۶۸	۱۰۵۰	۱۴۴	۱۰۵۳	۲۴۸۰	-۰٫۲۶	۵٫۳۰	-۰٫۱۱	۲۶۸

جدول ۲- عدد کئوردیناسیون سطح، عدد کئوردیناسیون توده و نسبت عدد کئوردیناسیون سطح به عدد کئوردیناسیون توده.

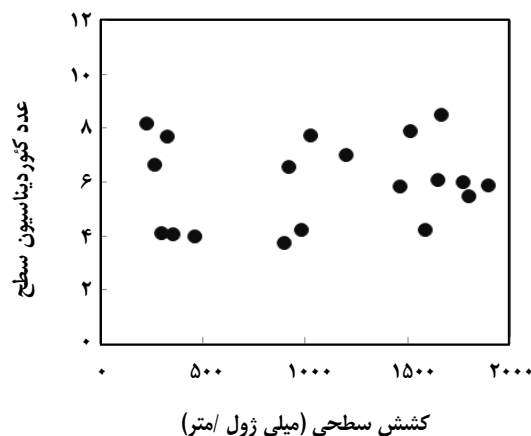
فلز	عدد کئوردیناسیون	عدد کئوردیناسیون سطح	نسبت عدد کئوردیناسیون سطح / عدد کئوردیناسیون توده
Ag	۱۱	۷	۰٫۶
Al	۱۲	۸	۰٫۷
Au	۱۱	۷	۰٫۶
Ba	۱۱	۸	۰٫۸
Ca	۱۱	۸	۰٫۷
Cd	۱۰	۴	۰٫۴
Ce	۱۱	۲۰	۱٫۸
Co	۱۱	۶	۰٫۵
Cr	۱۱	۴	۰٫۴
Cu	۱۱	۴	۰٫۳
Fe	۱۱	۶	۰٫۶
La	۱۱	۱۷	۱٫۵
Mg	۱۱	۴	۰٫۴
Mn	۱۱	۴	۰٫۴
Na	۱۰	۱۳	۱٫۲
Ni	۱۲	۵	۰٫۵
Pb	۱۱	۱۲	۱٫۱
Pd	۱۱	۶	۰٫۵
Pt	۱۱	۶	۰٫۵
Sr	۱۱	۷	۰٫۶
Ti	۱۱	۸	۰٫۷
Tl	۱۲	۱۳	۱٫۱
V	۱۱	۷	۰٫۷
Zn	۱۱	۴	۰٫۴
Zr	۱۱	۹	۰٫۴

عدد کئوردیناسیون سطح دارای مقدار کم‌تری نسبت به عدد کئوردیناسیون توده داراست. متفاوت بودن عدد کئوردیناسیون سطح فلزهای گوناگون از یک سو به ساختار، ماهیت فلز، چگالی، و از سوی دیگر به نیروهای بین‌مولکولی وابسته می‌باشد. علت اعشاری بودن عددهای کئوردیناسیون سطح در نظر گرفتن اثر برهم‌کنش مولکول‌ها در لایه دوم و سوم سطح با مولکول‌های لایه اول سطح است. ستون ۵ از جدول ۲ نسبت عدد کئوردیناسیون سطح به عدد کئوردیناسیون توده را نشان می‌دهد. این مقدار بین ۰٫۳ - ۰٫۸ است درحالی‌که این نسبت در تعدادی از مرجع‌ها

عدد کئوردیناسیون سطح نصف عدد کئوردیناسیون توده تعیین شده است. به عنوان نمونه گوتو نسبت ۰٫۵ را بین عدد کئوردیناسیون سطح و توده تخمین زده بود. البته این نکته دارای اهمیت است که گوتو ذره‌های فلزها را به صورت کره در نظر گرفته است [۲۱]. نتیجه‌های به دست آمده در جدول ۲ نشان می‌دهد عددهای کئوردیناسیون سطح مقدارهای کم‌تری را نسبت به عددهای کئوردیناسیون توده به خود اختصاص داده است. از آنجا که مولکول‌های سطح از یک سو با مولکول‌های توده مایع و از سوی دیگر با مولکول‌های فاز گاز رو به رو هستند.



شکل ۲- تغییرهای عدد کئوردیناسیون سطح و آنتالپی تبخیر (کیلوژول / مول) مذاب.



شکل ۱- تغییرهای عدد کئوردیناسیون سطح و کشش سطحی فلزهای مذاب.

شکل ۲- تغییرهای عدد کئوردیناسیون سطح و آنتالپی تبخیر فلزهای مذاب.

شکل ۱- تغییرهای عدد کئوردیناسیون سطح و کشش سطحی فلزهای مذاب.

استفان و وابستگی عدد کئوردیناسیون سطح به پارامترهای ترمودینامیکی، رابطه‌های جدیدی ارائه شود. رابطه‌های به‌دست آمده به همراه پارامترهای تنظیم‌پذیر در جدول ۳ گزارش شده است. در این دسته از روابط سعی شده است تا بیش‌تر از رابطه‌های خطی بین متغیرها استفاده شود. a, b, c, d و e پارامترهای تنظیم‌پذیر معادله‌های (۱) - (۸) بوده که با استفاده از روش کمینه کردن مجموع مربع خطاها به دست آمده و در جدول ۳ گزارش شده است. مقدار انحراف استاندارد توانایی مدل‌های ارائه شده را نشان می‌دهد. مقدار بسیار کم متوسط خطای مطلق نشان‌دهنده آن است که مدل‌های ارائه شده در حد قابل پذیرشی داده‌های آزمایشی را پوشش داده، و در استخراج ضریب‌های به‌دست آمده تا جای ممکن سعی شده است تا رابطه‌های معادله‌های تعریف شده گویای رابطه‌ی موجود مؤثر بین عددکئوردیناسیون سطح و پارامترها باشد.

نتیجه‌گیری

عدد کئوردیناسیون سطح ۲۱ فلز در حالت مذاب و با استفاده از پارامترهای فیزیکی محاسبه و گزارش شده است. وجود نسبت منطقی بین عدد کئوردیناسیون توده و سطح نشان درستی و قابلیت معادله به‌کار رفته می‌باشد. محاسبه‌های ساده و نیاز نداشتن به پارامترهای پیچیده از برتری‌های این روش بوده و امید است در آینده عدد کئوردیناسیون مایع‌ها نیز با روشی آسان قابل محاسبه شود.

حدود ۰/۵ گزارش شده است [۲۲، ۲۳]. یکی از علت‌های متفاوت بودن داده‌های عدد کئوردیناسیون سطح در منابع، متفاوت بودن عدد کئوردیناسیون توده و یکسان در نظر گرفتن عدد کئوردیناسیون توده در حالت جامد و مذاب است. همچنین وابسته بودن عدد کئوردیناسیون سطح به پارامترهای گوناگون در معادله استفان، و یکسان نبودن شرایط محاسبه از جمله دما امکان مقایسه اعداد کئوردیناسیون سطح فلزهای گوناگون را دشوار ساخته است. نکته قابل توجه دیگری که می‌توان از جدول ۲ دریافت اینست که با وجود این‌که عددهای کئوردیناسیون توده بیش‌تر فلزهای نزدیک به هم است ولی عددهای کئوردیناسیون سطح مقدارهای گوناگونی را نشان می‌دهد. این مطلب ناشی از تفاوت در نیروهای مؤثر در برهمکنش ذره‌ها در سطح فلزهای مذاب است. شکل‌های ۱-۴ تغییرهای عدد کئوردیناسیون سطح را با حجم مولی، آنتالپی تبخیر، کشش سطحی و عدد کئوردیناسیون سطح نشان می‌دهد. نمودارها نشان دهنده آن است که عدد کئوردیناسیون سطح نسبت به هریک از پارامترهای یاد شده پیرامون یک مقدار میانگین تغییر می‌کند.

همبسته نمودن عدد کئوردیناسیون سطح

رابطه‌های بسیاری به‌منظور محاسبه عدد کئوردیناسیون توده بر اساس ترمودینامیک آماری و تابع توزیع شعاعی تاکنون به‌کار گرفته شده است که یکی از مهم‌ترین ایرادهای این دسته از معادله‌های پیچیدگی و در دسترس نبودن پارامترهای لازم است [۲۴، ۲۵]. بنابراین در ادامه پژوهش حاضر سعی شده است با الهام از معادله

جدول ۳- رابطه‌های به‌دست آمده بر اساس وابستگی عدد کنوردیناسیون سطح و دما، حجم، آنتالپی، و عدد کنوردیناسیون توده به همراه پارامترهای تنظیم‌پذیر.

پارامترهای تنظیم‌پذیر مدل به‌کاررفته	c	b	a	d	میانگین انحراف استاندارد	میانگین خطا	میانگین خطای مطلق
$Z_s = aT + bV + cH + dZ$	-۰.۰۰۱	$۸.۲۵E-۶$	۰.۰۰۱	۰.۵۱	$۱.۲۶ E-۹$	$۱.۱۸ E-۱۱$	$۶.۵۶ E-۱۱$
$Z_s = T^a + V^b + H^c + Z^d$	-۰.۰۰۰۷۱	۰.۰۰۰۸۲	۰.۰۱۶۱	۰.۷۲	۰.۹۸	۰.۰۰۵۱	۰.۲۹
$Z_s = Ta + Vb + Hc + Z^2d$	۰.۰۰۰۶	۰.۰۰۰۱۹	۰.۰۰۶۱	۰.۰۴۵	۰.۱۷	۰.۰۱۹	۰.۱
$Z_s = (Ta + Vb + Zd) / cH$	۰.۰۴۳	۰.۶۴۳	۱.۰۸۵	۱.۹	۰.۸۱	۰.۰۱۹	۰.۱
$Z_s = aT^2 \cdot bV \cdot Zd \cdot cH$	۰.۰۰۰۰۲	۰.۳۲۴۱	$۷.۰۰E-۷$	$۶.۷ E-۴$	۰.۱۹۷۰	۰.۰۰۵۶	۰.۰۲۸
$Z_s = (aT \cdot Vb \cdot Zd) / cH$	$۵.۰۰ E-۱۲$	$۲.۰۰E-۱۲$	$۱.۵ E-۱۰$	$۸.۳ E-۱۰$	۱.۹۵	۰.۰۵۷۷	۰.۲۷۸

فهرست نمادها

$A_L(T)$	مساحت سطح در دمای T	σ	کشش سطحی
h	قطر اتمی	$\Delta_{vap} H_m^0$	آنتالپی تبخیر استاندارد مولی
ρ_L	چگالی	V	حجم
M	جرم اتمی	N_A	عدد آووگادرو
η	پارامتر تراکم‌پذیری	Z_s	عدد کنوردیناسیون سطح
		Z	عدد کنوردیناسیون توده
		$\gamma_{lv}(T)$	کشش سطحی مایع - بخار
		$H_v(T)$	آنتالپی تبخیر
		S(T)	آنتروپی فزونی سطح
		T	دما

قدردانی

نویسندگان مقاله از حمایت‌های مالی معاونت پژوهشی و فناوری دانشگاه ایلام صمیمانه تشکر می‌نمایند.

تاریخ دریافت: ۱۳۹۶/۴/۱۴؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۶/۸/۲۹

مراجع

[1] Mehdi pour N., Boushehri A., [Equation of State for Molten Alkali Metals from Surface Tension. Part II, Journal of Thermophysic, 19: 331–340 \(1998\).](#)

[۲] نیک سرشت، صابر؛ ریاضی مسعود؛ فرشچی تبریزی، فرشاد؛ معادله کشش بین سطحی فاز آلی - آب در حضور ماده فعال در سطح سدیم دودسیل سولفات (SDS)، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۲) ۳۷: ۱۸۳ تا ۱۹۳ (۱۳۹۷).

[3] Neumann A.W., David R., Zuo Y., [“Applied Surface Thermodynamics”](#), CRC Press: Florida (2011).

- [4] Fan J., Zhao X., Guo Z., [Surface Tension of Ethyl Fluoride \(HFC161\) from \(233 to 373\) K, *Fluid Phase Equilibria*, **316**: 98-101 \(2012\).](#)
- [5] Mozaffari F., [Modeling the Volumetric Properties of Metals from Heat of Vaporization, *Journal of Molecular Liquids*, **212**: 461-466\(2015\).](#)
- [6] Berry JD., Neeson MJ., Dagastine RR., Chan DYC., Tabor RF, [Measurement of Surface and Interfacial Tension Using Pendant Drop Tensiometry, *Journal of Colloid and Interface Science*, **454**: 226-237\(2015\).](#)
- [۷] جابرزاده، سعید؛ حقیقی اصل، علی؛ صفدری، سید جابر؛ رشیدی، عباس، [بررسی تأثیر افزودن الکل و فعال کننده های سطحی بر روی هیدرودینامیک راکتور هوابالابر در شرایط سه فاز، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، **۳۳**\(۴\): ۶۹ تا ۷۷ \(۱۳۹۳\).](#)
- [8] Mulero A., Cachadina I., [Recommended Correlations for the Surface Tension of Several Fluids Included in the REFPROP Program, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **43**: 023104 \(2014\).](#)
- [9] Aqra F., Ayyad A., [Surface Energies of Metals in Both Liquid and Solid States, *Applied Surface Science*, **257**: 6372-6379 \(2011\).](#)
- [10] Kumar Mishra R., Lalneihpuii R., Raghvindu Pathak A., [Investigation of Structure, Thermodynamic and Surface Properties of Liquid Metals Using Square Well Potential, *Chemical Physics*, **457**:13-18 \(2015\).](#)
- [11] Sdobnyakov Nickolay Y., Samsonov Vladimir M., [On the Size Dependence of Surface Tension in the Temperature Range from Melting Point to Critical Point, *Central European Journal of Physics*, **2**: 247-257\(2005\).](#)
- [12] Bourasseau E., Homman A. A., Durand O., Ghoufi A., Malfreyt P., [Calculation of the Surface Tension of Liquid Copper from Atomistic Monte Carlo Simulations, *The European Physical Journal B*, **86**: 251-266 \(2013\).](#)
- [13] Salomons E., Mareschal M., [Atomistic Simulation of Liquid-Vapour Coexistence: Binary Mixtures, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **3**: 36-45\(1991\).](#)
- [۱۴] میرزایی، بهروز؛ [ارایه قانون اختلاط جدید برای پیش بینی کشش سطحی مخلوطها، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، **۳۳**\(۲\): ۴۷ تا ۵۳ \(۱۳۹۳\).](#)
- [15] Digilov R. M., [The Law of Corresponding States and Surface Tension of Liquid Metals, *International Journal of Thermophysics*, **23**: 1381-1390\(2002\).](#)
- [16] Gharagheizi F., Eslamimanesh A., Sattari M., Mohammadi A H., Richon D., [Development of Corresponding States Model for Estimation of the Surface Tension of Chemical Compounds, *AIChE Journal*, **59**: 613-621 \(2013\).](#)
- [17] Mirjalili M., Vahdati-Khaki J., [Prediction of Nanoparticles' Size-Dependent Melting Temperature Using Mean Coordination Number Concept, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **69**: 2116- 2123 \(2008\).](#)

- [18] Carvalho P. J., Freire M. J., Marrucho I. M., Queimada A., Coutinho J. A. P., [Surface Tensions of Imidazolium Based Ionic Liquids: Anion, Cation, Temperature and Water Effect](#), *Journal of Chemical Engineering*, **53**: 1346-1350 (2008).
- [19] Strechan A. A., Kabo G. J., Paulechka Y. U., [The Correlations of the Enthalpy of Vaporization and the Surface Tension of Molecular Liquids](#), *Fluid Phase Equilibria*, **250**:125-130(2006).
- [20] Lu H. M., Jiang Q., [Surface Tension and Its Temperature Coefficient for Liquid Metals](#), *Journal of Physical Chemistry*, 109:15463-15468(2005).
- [21] Gotoh K., [Surface Tension of Liquids from the Coordination Number in Random Assemblage](#), *Industrial and Engineering Chemistry Fundamental*, **13**:287-289(1974).
- [22] Linh N.N., Hoang V.V., [Surface Structure and Structural Point Defects of Liquid and Amorphous Alumino Silicate Nanoparticles](#), *Journal of Physics Condensed Matter*, **20**: 265-275 (2008).
- [23] Flowers B. H., Mendoza E., "[Properties of Matter](#)", Vol. **34**, John Wiley & Sons, Inc., London, (1970).
- [24] Tao D.P., [A Comparison of the Molecular Interaction Volume Model with the Subregular Solution Model in Multicomponent Liquid Alloys](#), *Metallurgical and Materials Transactions A*, **35**(2): 419-424 (2004).
- [25] Tao D.P., [Prediction of the Coordination Numbers of Liquid Metals](#), *Metallurgical and Materials Transactions A*, **36**(12): 3495-3497 (2005).