



مقدمه‌ای بر ترمودینامیک آباری کاربردی

تألیف:

استنلی ای. سندلر

ترجمه:

دکتر غلامرضا پازوکی

عضو هیأت علمی دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)

دکتر شیوا عبدالرحیمی

مهندس الهام مفرح

پاییز ۱۳۹۸

سرشناسه	: ساندلر، استنلی ای.، ۱۹۴۰-م. Sandler, Stanley I.
عنوان و نام پدیدآور	: مقدمه‌ای بر ترمودینامیک آماری کاربردی / تالیف استنلی ای. ساندلر
ترجمه	: دکتر غلامرضا پازوکی، شیوا عبدالرحیمی، الهام مفرح
مشخصات نشر	: تهران: دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)، ۱۳۹۸
مشخصات ظاهری	: ۵۳۶ ص.
شابک	: 978-964-463-756-8
وضعیت فهرست‌نویسی	: فیا
عنوان اصلی	: An introduction to applied statistical thermodynamics. e 2011
موضوع	: ترمودینامیک آماری
موضوع	: Statistical thermodynamics
موضوع	: ترمودینامیک -- کاربردهای صنعتی
موضوع	: Thermodynamics - - Industrial applications
شناسه رده	: پازوکی، غلامرضا، ۱۳۵۲-، مترجم
شناسه افزوده	: عبدالرحیمی، شیوا، ۱۳۶۵-، مترجم
شناسه افزوده	: مفرح، الهام، ۱۳۴۹-، مترجم
شناسه افزوده	: دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران). مرکز نشر
رده‌بندی کنگرد	: ۱۳۹۷: ۲ س ۴ ت ۱۵۵/۲ TP
رده‌بندی دیویی	: ۶۲۱.۴۰۳
شماره کتابشناسی ملی	: ۱۶۵۳۰۲



انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر
(پلی تکنیک تهران)

این کتاب در جلسه مورخ ۱۳۹۷/۶/۱۱ شورای چاپ و
نشر دانشگاه صنعتی امیرکبیر به تصویب رسیده است.

عنوان کتاب	: مقدمه‌ای بر ترمودینامیک آماری کاربردی
تالیف	: استنلی ای. ساندلر
ترجمه	: دکتر غلامرضا پازوکی - دکتر شیوا عبدالرحیمی - الهام مفرح
ناشر	: انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)
چاپ و صحافی	: انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)
چاپ اول	: پاییز ۱۳۹۸
قیمت	: ۴۸,۰۰۰ تومان
تیراژ	: ۱۰۰ نسخه
شابک	: ISBN: 978-964-463-756-8 ۹۷۸-۹۶۴-۴۶۳-۷۵۶-۸

آدرس مرکز پخش: خیابان ولیعصر، روبروی خیابان بزرگمهر، فروشگاه کتاب مرکز نشر

دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران) - تلفن: ۶۶۴۹۸۸۶۸

وبسایت: <http://publication.aut.ac.ir>

حق چاپ برای ناشر محفوظ است.

پیشگفتار مترجمین

ترمودینامیک آماری علمی است که ارتباط بین خواص ماکروسکوپی ترمودینامیکی و خواص میکروسکوپی را برقرار می‌کند. در حقیقت این شاخه از علم به عنوان پلی بین دنیای ماکروسکوپی و دنیای میکروسکوپی است. ترمودینامیک کلاسیک در توجیه بعضی از خواص ترمودینامیکی نظیر ظرفیت گرمایی گازهای دو اتمی و ظرفیت گرمایی جامدات ناتوان است. بنابراین ضرورت پرداختن به این حوزه از علم ترمودینامیک بیش از پیش احساس می‌شود. البته با توجه به این که تعداد سیستم‌ها و حالت‌های موجود در ترمودینامیک آماری بسیار زیاد است به‌طور عملی تجزیه و تحلیل ساده ترین حالت‌های ممکن بسیار سخت و دشوار است و بدون دانش پایه ریاضیات و آمار امکان تجزیه و تحلیل این زمینه علمی وجود ندارد. در زمینه ترمودینامیک آماری تاکنون کتاب‌های مختلفی چاپ شده است که از آن جمله می‌توان به کتاب ترمودینامیک مک کوآری و هیل اشاره نمود. اما کتاب حاضر به توسط پروفسور استنلی سندلر تألیف شده است یکی از معدود کتاب‌ها در زمینه ترمودینامیک آماری است که به صورت کاربردی نوشته شده است. فصل‌هایی از این کتاب برای دانشجویان دو ساله کارشناسی رشته‌های شیمی و مهندسی شیمی و رشته‌های مرتبط می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد و فصل‌های نهایی می‌تواند به عنوان مرجعی برای دانشجویان تحصیلات تکمیلی در رشته‌های مذکور در نظر گرفته شود. مترجمین، این کتاب را به جستجوگران در عرصه علم و دانش به خصوص کسانی که در زمینه علم ترمودینامیک تحقیق می‌کنند تقدیم می‌کنند. لازم به ذکر است که ترجمه حاضر خالی از اشکال نمی‌باشد. مترجمین از هرگونه پیشنهاد و انتقاد سازنده در زمینه ترجمه کتاب حاضر استقبال می‌کنند.

دکتر رضا پازوکی

دکتر شهلا بن‌الرحیمی

الهه طرح

فهرست

فصل اول: مقدمه‌ای بر ترمودینامیک آماری	۱
۱-۱- هدف ترمودینامیک آماری	۱
۲-۱- حالت‌های ماکروسکوپی و میکروسکوپی	۳
۳-۱- بیان مکانیک کوانتومی از حالت‌های میکرو	۴
۴-۱- فرضیه‌های مکانیک آماری	۶
۵-۱- توزیع انرژی بولتزمن	۷
فصل دوم: تابع تقسیم کانونیکال	۱۳
۱-۲- برخی از خواص تابع تقسیم کانونیکال	۱۳
۲-۲- رابطه تابع تقسیم کانونیکال با خواص ترمودینامیکی	۱۵
۳-۲- تابع تقسیم کانونیکال برای یک ماکروسیستم با چندین حالت انرژی مستقل	۱۶
۴-۲- تابع تقسیم کانونیکال برای مجموعه‌ای از اندام‌های فاقد برهمکنش مشابه	۱۷
مسائل فصل دوم	۱۹
فصل سوم: گاز ایده‌آل تک‌اتمی	۲۱
۱-۳- تابع تقسیم کانونیکال برای یک گاز ایده‌آل تک‌اتمی	۲۱
۲-۳- معرفی β به عنوان تابعی از $1/kT$	۲۴
۳-۳- روابط کلی تابع تقسیم کانونیکال نسبت به دیگر کمیت‌های ترمودینامیکی	۲۵
۴-۳- خواص ترمودینامیکی گاز ایده‌آل تک‌اتمی	۲۸
۵-۳- افت‌وحیز انرژی در مجموعه کانونیکال	۳۷
۶-۳- رابطه آنتروپی گیبس	۴۲
۷-۳- هم‌ترازی حالت انتقالی	۴۴
۸-۳- قابلیت تشخیص، عدم تشخیص و تناقض گیبس	۴۶
۹-۳- یک مقایسه بین مکانیک کلاسیک - مکانیک کوانتومی: توزیع سرعت ماکسول - بولتزمن	۴۹
مسائل فصل سوم	۵۳

فصل چهارم: گازهای ایده‌آل دو اتمی و چند اتمی ۵۷

۱-۴- تابع تقسیم یک گاز ایده‌آل دو اتمی ۵۷

۱-۴- الف- توابع تقسیم انتقالی و هسته‌ای ۵۸

۱-۴- ب- تابع تقسیم دورانی ۵۸

۱-۴- ج- تابع تقسیم ارتعاشی ۶۱

۱-۴- د- تابع تقسیم الکترونی ۶۳

۲-۴- خواص ترمودینامیکی گاز ایده‌آل دو اتمی ۶۴

۳-۴- تابع تقسیم یک گاز ایده‌آل چند اتمی ۶۸

۴-۴- خواص ترمودینامیکی گاز ایده‌آل چند اتمی ۷۰

۵-۴- ظرفیت‌های گرمایی گازهای ایده‌آل ۷۴

۶-۴- تجزیه و تحلیل حالت نرمال: ارتعاشات یک مولکول خطی سه اتمی ۷۴

مسائل فصل چهارم ۷۹

فصل پنجم: واکنشهای شیمیایی در گازهای ایده‌آل ۸۳

۱-۵- مخلوط گاز ایده‌آل فاقد واکنش ۸۴

۲-۵- تابع تقسیم یک مخلوط شیمیایی ایده‌آل همراه با واکنش ۸۵

۳-۵- سه استخراج متفاوت ثابت تعادل شیمیایی در یک مخلوط گاز ایده‌آل ۸۷

۴-۵- افت‌وخیز در یک سیستم همراه با واکنش شیمیایی ۹۱

۵-۵- مخلوط گازی همراه با واکنش شیمیایی: حالت کلی ۹۴

مسائل فصل پنجم ۱۰۷

فصل ششم: توابع تقسیم دیگر ۱۱۳

۱-۶- مجموعه میکروکانونیکال برای یک سیال خالص ۱۱۴

۲-۶- مجموعه کانونیکال بزرگ برای یک سیال خالص ۱۱۵

۳-۶- مجموعه هم‌فشار - هم‌دما ۱۱۹

۴-۶- مجموعه کانونیکال محدود شده بزرگ یا نیمه-بزرگ ۱۲۰

مسائل فصل ششم ۱۲۴

فصل هفتم: مولکول‌های دارای برهمکنش در یک گاز ۱۲۷

۱-۷- انتگرال پیکربندی ۱۲۷

۲-۷- خواص ترمودینامیکی از انتگرال پیکربندی ۱۳۰

۳-۷- فرض جمع‌پذیری دو به دو ۱۳۱

۴-۷- تابع خوشه‌مایر و انتگرال‌های غیرقابل کاهش ۱۳۲

۵-۷- معادله حالت ویریا ۱۴۲

۶-۷- معادله حالت ویریا برای مولکول‌های چند اتمی ۱۴۸

۷-۷- خواص ترمودینامیکی از معادله حالت ویریا ۱۵۰

۸-۷- به دست آوردن ضرایب ویریا از مجموعه کانونیکال بزرگ ۱۵۳

۹-۷- محدوده قابل کاربرد معادله ویریا ۱۵۹

مسائل فصل هفتم ۱۶۰

فصل هشتم: پتانسیل‌های بین‌مولکولی و تخمین ضرایب دوم ویریا ۱۶۳

۱-۸- پتانسیل‌های برهمکنش برای مولکول‌های گازی ۱۶۴

پتانسیل کرات سخت ۱۶۴

پتانسیل دافعه مراکز نقطه‌ای ۱۶۶

پتانسیل کولن ۱۶۶

پتانسیل‌های همراه با جاذبه ۱۶۷

پتانسیل چاه مربعی ۱۶۷

پتانسیل‌های مای و لنارد-جونز ۱۷۰

پتانسیل بوان-۶ (بکینگهام اصلاح شده) ۱۷۳

پتانسیل بوکاو ۱۷۳

۲-۸- ضریب دوم ویریا در یک مخلوط: پتانسیل‌های برهم‌کنش بین اتم‌های متفاوت ۱۷۶

۳-۸- پتانسیل‌های برهم‌کنش برای مولکول‌های چند اتمی، غیرکروی، پروتئین‌ها و کلونیدها ۱۷۸

کره سخت حاوی یک دوقطبی.....	۱۸۱
پتانسیل استوک مابر (پتانسیل لنارد- جونز ۶-۱۲ + دوقطبی).....	۱۸۱
۴-۸ کاربردهای مهندسی و بیان‌های معادله حالت ویریا.....	۱۸۳
استفاده از معادله حالت ویریا به عنوان یک ابزار مهندسی.....	۱۸۳
قوانین اختلاط معادلات حالت ساده.....	۱۸۵
مسائل فصل هشتم.....	۱۸۸
فصل نهم: بلورهای تک‌اتمی.....	۱۹۳
۹-۱- مدل انیشتین برای یک بلور.....	۱۹۴
۹-۲- مدل دیبای یک بلور.....	۱۹۸
۹-۳- آزمون ظرفیت گرمایی مدل‌های دیبای و انیشتین برای یک بلور.....	۲۰۶
۹-۴- فشار صغیر انتالی بلورها.....	۲۰۸
۹-۵- یک تفسیر بلور سرم ترمه دینامیک.....	۲۱۰
مسائل فصل نهم.....	۲۱۱
فصل دهم: مدل‌های شبکه ساده برای بلورها.....	۲۱۵
۱۰-۱- مقدمه.....	۲۱۶
۱۰-۲- توسعه معادلات حالت از نظریه شبکه.....	۲۱۸
۱۰-۳- مدل‌های ضریب فعالیت برای مولکول‌های با اندازه متوسط و نظریه شبکه.....	۲۲۲
۱۰-۴- فلوری- هاگینز و مدل‌های دیگر برای سیستم‌های پلیمری.....	۲۲۷
۱۰-۵- مدل ایزینگ.....	۲۳۴
مسائل فصل دهم.....	۲۴۲
فصل یازدهم: مولکول‌های دارای برهمکنش در یک سیال متراکم. توابع توزیع پیکربندی.....	۲۴۵
۱۱-۱- توابع احتمال چگالی فضایی کاهش یافته.....	۲۴۶
۱۱-۲- خواص ترمودینامیکی از تابع همبستگی جفتی.....	۲۵۱
۱۱-۳- تابع همبستگی جفتی (تابع توزیع شعاعی) در چگالی پایین.....	۲۵۵

۲۵۹	۴-۱۱- روش‌های تخمین تابع همبستگی جفت در چگالی بالا
۲۶۲	۵-۱۱- افت و خیزها در تعداد ذرات و معادله تراکم‌پذیری
۲۶۶	۶-۱۱- تخمین تابع توزیع شعاعی سیالات با استفاده از اشعه ایکس همسان یا تفرق نوترن
۲۷۷	۷-۱۱- تخمین تابع توزیع شعاعی سیالات مولکولی
۲۷۸	۸-۱۱- تخمین عدد کوردیناسیون از تابع توزیع شعاعی
۲۸۱	۹-۱۱- تخمین تابع توزیع شعاعی کلونیدها و پروتئین‌ها
۲۸۲	مسائل فصل یازدهم
۲۸۷	فصل دوازدهم: نظایرهای معادله انتگرال برای تابع توزیع شعاعی
۲۸۷	۱-۱۲- معادله بون-رور-گرن (YBG)
۲۹۰	۲-۱۲- تقریب جمع آثار رگور
۲۹۲	۳-۱۲- معادله اورنشتین-زرنیک
۲۹۴	۴-۱۲- بستر برای معادله اورنشتین-زرنیک
۳۰۰	۵-۱۲- معادله حالت کرده-سخت پرکاد-ریک
۳۰۲	۶-۱۲- توابع توزیع شعاعی و خواص ترمودینامیک محلول‌ها
۳۰۴	۷-۱۲- پتانسیل نیروی متوسط
۳۱۵	۸-۱۲- فشار اسمزی و پتانسیل نیروی متوسط برای محلول‌های رزینی و کلونیدی
۳۱۸	مسائل فصل دوازدهم
۳۲۱	فصل سیزدهم: تعیین تابع توزیع شعاعی و خواص سیال با شبیه‌سازی رایانه‌ای
۳۲۲	۱-۱۳- مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی رایانه‌ای در سطح مولکولی
۳۲۷	۲-۱۳- خواص ترمودینامیکی با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی
۳۳۲	۳-۱۳- شبیه‌سازی مونتکارلو
۳۳۷	۴-۱۳- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۳۴۲	مسائل فصل سیزدهم
۳۴۵	فصل چهاردهم: نظریه اختلال

- ۱۴-۱- نظریه اختلال برای پتانسیل چاه- مربعی ۳۴۶
- ۱۴-۲- نظریه اختلال مرتبه اول بارکر- هندرسون ۳۵۱
- ۱۴-۳- نظریه اختلال مرتبه دوم ۳۵۵
- ۱۴-۴- نظریه اختلال با استفاده از دیگر پتانسیل‌های مرجع ۳۵۸
- ۱۴-۵- کاربردهای مهندسی نظریه اختلال ۳۶۲
- محلول‌های پروتینی، کلوئیدی و پلیمری ۳۶۴
- مسائل فصل چهاردهم ۳۶۴
- فصل پانزدهم: یک نظریه از محلول‌های الکترولیت رقیق و گازهای یونیزه شده ۳۶۷
- ۱۵-۱- محلول‌های حاوی یون‌ها (و الکترون‌ها) ۳۶۸
- ۱۵-۲- نظریه دیل-هوکل ۳۷۲
- ۱۵-۳- ضریب فعالیت یون متوسط ۳۸۶
- مسائل فصل شانزدهم ۳۹۲
- فصل شانزدهم: به دست آوردن مدل‌های ترمودینامیکی از تابع تقسیم تعمیم یافته واندروالس ۳۹۳
- ۱۶-۱- پیش‌زمینه مکانیک- آمار ۳۹۴
- ۱۶-۲- کاربرد تابع تقسیم تعمیم یافته واندروالس برای سیالات خالص ۳۹۹
- حجم آزاد ۳۹۹
- پتانسیل متوسط ۴۰۱
- ۱۶-۳- معادلات حالت برای مخلوط‌ها از تابع تقسیم تعمیم یافته واندروالس ۴۱۰
- حجم آزاد در مخلوط‌ها ۴۱۳
- عدد کوردیناسیون جزء- جزء ۴۱۵
- ۱۶-۴- مدل‌های ضریب فعالیت از تابع تقسیم تعمیم یافته واندروالس ۴۲۰
- عبارت حجم آزاد ۴۲۲
- پتانسیل متوسط ۴۲۴
- ۱۶-۵- مولکول‌های زنجیرهای و پلیمرها ۴۳۴

۱۶-۶- پیوند هیدروژنی و سیالات تجمع دهنده ۴۳۸

۴۴۰ مسائل فصل شانزدهم

www.ketab.ir