

引用信息: Liang Shi-Qiang; Zhang Bing-Jian; Lu Ying-Hong; Hu Wen-Xuan; Jin Zhi-Jun. Acta Phys. -Chim. Sin., 2001, 17(05): 416-421 [梁世强; 张秉坚; 路映红; 胡文暄; 金之钧. 物理化学学报, 2001, 17(05): 416-421]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

链状分子状态方程的推导及热容的推算

梁世强; 张秉坚; 路映红; 胡文暄; 金之钧

浙江大学化学系, 杭州 310027; 南京大学地球科学系, 南京 210093; 石油大学盆地与油藏研究中心, 北京 102200

摘要:

在Barker-Henderson, Zhang以及Wertheim等微扰理论的基础上,以方阱势硬球流体为参考体系,将Zhang的解析表达方法与Wertheim的链成键自由能的处理方法结合起来,推导出自由链接的链状分子流体的Helmholtz自由能的解析表达式,并得到了压缩因子、内能、恒容热容等热力学性质的计算式.计算结果与MC(Monte Carlo)模拟结果吻合良好.对Zhang的解析表达式与“TPT-D”(二阶Wertheim微扰理论)的结合也作了推导和计算.

关键词: 链分子 方阱势 微扰理论 热力学性质 MC模拟

收稿日期 2000-09-21 修回日期 2000-12-19 网络版发布日期 2001-05-15

通讯作者: 张秉坚 Email: zbj@mail.hz.zj.cn

本刊中的类似文章

1. 江云宝; 许金钧. 烷基苯基铵对芘的荧光猝灭行为研究[J]. 物理化学学报, 1992, 8(05): 697-701

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1433KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 链分子

▶ 方阱势

▶ 微扰理论

▶ 热力学性质

▶ MC模拟

本文作者相关文章

▶ 梁世强

▶ 张秉坚

▶ 路映红

▶ 胡文暄

▶ 金之钧