

## عنوان مقاله:

مدل سازی مایعات مولکولی و محاسبه عددی ثابت های کشسانی آن ها با استفاده از همبستگی مستقیم بین مولکول ها

## محل انتشار:

دومین همایش ملی ریاضیات و کاربردهای آن در علوم مهندسی (سال: ۱۳۹۴)

تعداد صفحات اصل مقاله: ۵

## نویسندگان:

مریم قلی زاده آرشتی - دانشکده فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام (ره)، شهر ری، ایران

محمد مهدی قره بیگی - گروه فیزیک آموزشکده فنی شهید رجایی شیراز، دانشگاه فنی و حرفه ای، شیراز، ایران

## خلاصه مقاله:

در این مقاله مایعات مولکولی به شکل کره های سخت مدل سازی شده است. تابع همبسته مستقیم این نوع مایعات با استفاده از تابع انرژی و با استفاده از روش های عددی محاسبه شده است. سپس این تابع برای چگالی های مختلف محاسبه و با نتایج بدست آمده از بستار PY، نتایج شبیه سازی شده و تابع همبسته مستقیم پیشنهادی مرادی و همکارانش مقایسه شده است. مشاهده شد که تابع همبسته مستقیم بدست آمده در چگالی های پایین با تمامی نتایج ذکر شده و در چگالی های بالا با نتایج حاصل از شبیه سازی که به واقعیت نزدیکتر است در توافق بسیار خوبی می باشند. در نهایت با تابع همبسته مستقیم بدست آمده ثابت های کشسانی این نوع مایعات محاسبه شده است

## کلمات کلیدی:

مایعات مولکولی، کره سخت، تابع همبسته مستقیم، ثابت کشسانی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/۴۲۰۷۲۰>