



شیمی و مهندسی شیمی

تهران - بهمن ۱۳۹۷

مدل سازی رفتار دی الکتریک کتون های خالص با استفاده از برنامه نویسی بیان ژن

سما حسین دوست^۱، علی قناد زاده گیلانی^۱، محمد محمد پور مقدم^۲

۱- دانشگاه گیلان، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

۲- دانشگاه گیلان، دانشکده فنی و مهندسی شرق، گروه علوم مهندسی

ثابت دی الکتریک استاتیک یا گذردهی نسبی یک ماده نشان دهندهی ظرفیت خازنی مواد نسبت به خلأ است. هزینه های مترتب و لزوم دسترسی به تجهیزات مرتبط و نیز دشواری های تجربی و زیست محیطی برای اندازه گیری ضریب دی الکتریک مواد منجر به ایجاد تمایل روزافزون برای پیش بینی و مدل سازی رفتار این سیستم ها به صورت تئوری می گردد. به منظور کاربرد برنامه نویسی بیان ژنی در توصیف رفتار دی الکتریک کتون های خالص لازم است مجموعه ای از داده های تجربی در گروه های ساده، حلقوی و شاخه دار در کنار مجموعه ای از توصیفگرهای مولکولی و فیزیکی (شامل جرم مولی، نقطه جوش، نقطه ذوب، دمای بحرانی، فشار بحرانی، حجم بحرانی، چگالی، ضریب شکست، حجم مولکولی، انرژی آزاد گیبس و ضریب دی الکتریک) به صورت جدول داده ها گردآوری شوند. در فرایند مدل سازی، داده ها از طریق رابط نرم افزار اکسل به محیط برنامه معرفی می گردند با اجرای فرایند مدل سازی مرحله به مرحله متغیرهای فوق ارزیابی و بهینه می گردند تا در نهایت ضمن دستیابی به حداکثر دقت مدل سازی، ساده ترین الگوی ریاضی قابل حصول مشخص گردد.

کلمات کلیدی: ضریب دی الکتریک، برنامه نویسی بیان ژن، ترکیبات خالص، کتون ها

۱. مقدمه و تئوری

ثابت دی الکتریک استاتیک یا گذردهی نسبی یک ماده نشان دهندهی ظرفیت خازنی مواد نسبت به خلأ است و در بسیاری از کاربردهای صنعتی مهم مانند تولید نانو سرامیک های ماکروویو دی الکتریک، استفاده از اندازه گیری ثابت دی الکتریک در تجزیه لجن ماکروویو و فرآیندهای تصفیه فاضلاب، در صنایع الکترونیک در مورد عملکرد خازن، صنایع دارویی برای حمایت از تحقیقات و تولید مواد مخدر بکار برده می شود. در کنار مطالعات تجربی برای اندازه گیری ضریب دی الکتریک ترکیبات به واسطه هزینه های مترتب و لزوم دسترسی به تجهیزات مرتبط و نیز دشواری های تجربی و زیست محیطی منجر به ایجاد تمایل روزافزون برای پیش بینی و مدل سازی رفتار این سیستم ها به صورت تئوری می گردد. در این مسیر مدل های تئوری بر اساس مبانی فیزیکی و ترمودینامیکی توسعه داده شده اند که مدل های توسعه یافته جهت پیش بینی ثابت دی الکتریک مخلوط ها ارائه شده اند از جمله این مدل ها می توان مدل های لوینگا، باچر-برودویچ، پئون-ایگلسیاس، لیچتنکر-رادر، بروگمان، کرازوسکی، ایگلسیاس-پوئن، انساکر، وینر، رالی-ماکسول، آپر براون، براون، سن، اونساکر-باچر، اوستر، ایگلسیاس و گراس را نام برد [۱].

1. Corresponding author: Sama Hosseindoost
Email: Sama.hosseindoost@yahoo.com