

밀도변화에 따른 CO기체 분자의 YHB 동경분포함수에 대한 연구

윤종호[†] · 김해원

경일대학교 공과대학 공업화학과
(1999년 2월 3일 접수, 1999년 3월 31일 채택)

A Density Dependent Study on YHB RDF of Gaseous CO Molecule

Jong Ho Yoon[†] and Hae Won Kim

Department of Industry Chemical, College of Engineering, Kyungil University, Kyungsan 712-701, Korea
(Received February 3, 1999; accepted March 31, 1999)

요약: Stockmayer 분자 모델을 도입하여 선형분자인 CO 분자를 쌍극자 분자로 단순화하여 CO 기체의 YHB 동경분포함수 (radial distribution function)를 컴퓨터로 계산하였다. 얻어진 CO 분자의 YHB 동경분포함수의 신뢰도는 여러 온도에서의 밀도 변화에 따른 CO 기체의 압력을 계산하여 조사하였다. 계산된 압력들은 문헌에 알려진 CO 기체의 압력과 잘 일치하였으며 계산에 사용된 온도는 273, 298, 373 K, 그리고 조사한 밀도의 범위는 최대 약 $0.013 / \text{Å}^3$ (최대 압력 = 1000 atm)까지이다. 계산된 압력들이 문헌에 나타난 실험치와 잘 일치하는 것으로 나타났으므로 구해진 YHB 동경분포함수는 CO 분자의 압력과 같은 밀도변화에 민감한 각종 물리 화학적 평형 양들을 신뢰성있게 계산 및 예측할 수 있을 것으로 기대된다. 또한 이 연구에서 CO 기체의 dipole-dipole 상호작용은 약 2.5 분자직경까지 효과적으로 작용하는 것으로 나타났다.

Abstract: The YHB radial distribution functions of a linear gas molecule CO were calculated by a computer within the Stockmayer molecular potential model, which assumed the CO molecule as a simple dipolar molecule. To examine the validity of the obtained YHB radial distribution of CO gas molecule, the density dependent pressures of CO at several temperatures were also calculated. The calculated pressures showed a good agreement with literally known experimental CO pressure data. The temperatures examined were 273, 298, and 373 K and the densities were up to $0.0132 / \text{Å}^3$ (maximum pressure = 1000 atm). Since the calculated pressures showed a good agreement with the experimental values, the obtained YHB radial distribution functions of CO molecule seemed good enough to obtain and predict various equilibrium physical and chemical quantities of CO molecule sensitive to density such as pressure. It was also found that in CO gas system the dipole-dipole interaction is effective up to approximately 2.5 molecular diameter.

Key words: CO, Radial Distribution Function, Dipole-dipole Interaction, Pressure

1. 서 론

CO기체는 각종 금속의 환원제, 메칠알콜, 아세트산 등의 각종 유기물의 제조에 원료물질로 사용되는 공업적으로 중요한 기체이다. 특히 CO기체를 원료물질로 하여 각종 유기물을 제조할 때 CO기체가 포함된 반응은 고온 (약 100~300 °C) 고압 (약 100~600 atm)의 조건하에서 활성화되어 반응이 진행된다[1]. 이러한 CO기체의 특성을 이해하기 위해 CO기체의 밀도 및 온도 변화에 따른 동경분포함수 (radial distribution function)의 변화를 조사해 보았다. 동경분포함수는 한 분자의 주위에 다른 분자가 존재할 수 있는 분포확률을 분자의 동경거리에 따라 나타낸 것으로 기체의 밀도 및 온도에 따라 민감하게 변하는 분자간 상호작용의 직접적인 함수이다. 이를 역으로 해석하면, 주어진 분자의 동경분포함수를 분석하면 온도 및 밀도변화에 따른 분자간 상호작용의 변화를 직접적으로 알아 낼 수 있다는 것을 뜻한다[2].

실험적으로 분자의 동경분포함수를 측정하려면 X-Ray 회절법 [3]이나 neutron 회절법[4]을 사용하면 가능하며, 이론적으로는 통계역학의 이론을 도입한 Monte Carlo법이나 molecular dynamics

법을 이용한 computer simulation을 이용하여 수치적으로 구할 수 있다[5]. 밀도 및 온도를 변수로 하는 동경분포함수의 해석학적인 형식은 분자간 상호작용이 없는 hard sphere 시스템을 기준으로 하여 분자간에 존재하는 상호작용을 섭동으로 처리한 Baker와 Henderson (BH)의 섭동법을 사용하면 된다[6]. 본 CO기체 분자에 대한 연구에서는 BH 섭동법을 연속적으로 사용하여 분자간 상호작용이 비교적 강한 비구형 분자들에까지 적용할 수 있도록 고안된 Yoon, Hacura, Baglin (YHB)[7]에 의해 유도된 YHB 동경분포함수의 형식을 사용하였다. YHB 동경분포함수 형식은 비구형 사중극자 분자인 CO₂[7], C₂H₄[8], 그리고 H₂[9]와 같은 기체 시스템에 적용하여 넓은 범위의 온도와 밀도에서 spectral intensity, 압력, 그리고 zeolite encapsulation capacity등과 같은 평형상태의 성질들을 성공적으로 재현한 바 있다. 본 연구에서는 쌍극자 분자인 CO 분자에도 YHB 동경분포함수를 적용하여 그 정당성을 조사해 보았다.

분자간 상호작용은 밀도의 가장 직접적인 함수이며, 동경분포함수는 분자간 상호작용 변화에 따라 특히 민감하게 변화한다. 따라서, 이러한 밀도를 변수로 하는 동경분포함수의 연구는 분자간에 작용하는 주된 상호작용 (CO 분자의 경우 쌍극자간 상호작용)의 유효작용범위를 결정할 수 있게 해준다. 이러한 연구는, 특히 분자 차원의 아주 짧은 분자간 거리 내에서의 분자간 상호작용에 대한

[†] 주 저자 (e-mail: yoonjh@bear.kyungil.ac.kr)

정확한 정보를 얻을 수 있어서, 이러한 상호작용이 중요한 변수가 되는 흡착, 촉매 현상, 혹은 최근 들어 많은 연구가 되고 있는 각종 제올라이트, 활성탄 등의 분자크기 차원의 다공성 고체 내에서 일어나는 현상인 기체의 encapsulation[4] 현상을 이용한 각종 연료기체 및 유독성 기체의 저장[10], 그리고 이러한 현상들을 이용하여 분자단위의 제어로 이루어지는 각종 유기물의 micro synthetic 공법[11] 등의 개발에 유용하게 사용할 수 있다.

2. 이 론

2.1. CO 분자의 포텐셜 모델

CO 분자는 선형분자로써 영구 쌍극자를 가지고 있다. 이러한 쌍극자 분자에 대한 YHB 동경분포함수는 방향성이 없는 Lennard-Jones 상호작용을 기준으로 하고, 쌍극자간 상호작용을 섭동으로 취급하면 얻을 수 있다. Stockmayer 포텐셜[12]은 이러한 목적으로 사용할 수 있는 포텐셜 중 가장 적합한 모델 중 하나이다. CO 분자를 Stockmayer 포텐셜 모델로 묘사하면 CO 분자는 방향성이 없는 Lennard-Jones 상호작용 항과 방향성을 가진 CO 분자 쌍극자간 상호작용 항으로 표현된다. 임의 온도 및 밀도에서의 CO 분자의 YHB 동경분포함수는 CO 분자의 쌍극자간 상호작용 항을 섭동으로 취급하여 BH 섭동법을 응용하면 구할 수 있다. CO 분자의 Stockmayer 포텐셜 함수는 식 (1)과 같이 나타낸다.

$$U_{ST}(r) = U_{LJ}(r) + U_{DD}(r) \tag{1}$$

여기서 $U_{ST}(r)$, $U_{LJ}(r)$, 및 $U_{DD}(r)$ 은 각각 Stockmayer 포텐셜, Lennard-Jones 포텐셜, 그리고 쌍극자간 상호작용을 나타내며 r 은 분자간 거리를 나타낸다. $U_{LJ}(r)$ 는 식 (2)로 표현된다.

$$U_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \tag{2}$$

식 (2)에서 σ 와 ϵ 는 Lennard-Jones 인자로써, σ 는 두 분자간 인력이 0이 되는 지점의 분자간 거리를 나타내며, ϵ 은 Lennard-Jones 포텐셜의 깊이를 나타낸다. 한편, $U_{DD}(r)$ 은 식 (3)으로 표현된다.

$$U_{DD}(r) = -\beta \left(\frac{2}{3}\right) \frac{D^4}{r^6} \tag{3}$$

식 (3)의 β 는 Boltzmann 상수와 온도의 곱에 역수를 취한 값이며, D 는 CO 분자의 영구 쌍극자를 나타낸다. $U_{DD}(r)$ 은 쌍극자간 상호작용을 거리 및 쌍극자간 각도의 함수로 나타낸 다음 CO 분자의 자유회전을 고려하여 전 방향에 대하여 각평균을 취하여 얻어졌다. 각평균을 취할 때 Boltzmann 인자를 도입하여 CO 분자의 자유회전에 따라 변화하는 쌍극자간 상호작용의 세기를 인력이 세어지는 방향의 구조에서 좀 더 오랫동안 유지할 수 있도록 하여 CO 분자의 쌍극자간 상호작용의 방향성이 반영되어 있는 형식이 된다[12].

2.2. CO 분자의 YHB 동경분포함수

CO 분자의 YHB 동경분포함수는 BH 섭동법을 적용하여 얻은 Lennard-Jones 동경분포함수를 기준으로하여 쌍극자간 상호작용을 나타내는 포텐셜 $U_{DD}(r)$ 를 섭동으로 처리하여 구하였다. Lennard-Jones 동경분포함수를 얻을 때 사용한 hard sphere 동경분포함수는 Throop과 Bearman[13]에 의해 얻어진 형식에 Verlet과 Weis[14]의 보정항을 고려하여 얻어진 것으로 Monte Carlo법이나 molecular dynamics법 등의 컴퓨터를 이용한 계산치와 동일한 결

과를 준다고 알려져 있다[5]. Stockmayer 포텐셜 모델을 사용하여 나타난 CO 분자의 YHB 동경분포함수의 형식은 식 (4)와 같다[7].

$$g(r) = g_{LJ}(r) \left[1 - \beta \frac{U_{DD}(r)}{1 - \frac{\beta e}{3} \int_0^\infty 4\pi r^3 U'_{LJ}(r) g_{LJ}(r) dr} \right] \tag{4}$$

식 (4)에서 $g(r)$ 은 CO 기체 분자의 YHB 동경분포 함수, $g_{LJ}(r)$ 은 기준 Lennard-Jones 동경분포함수, $U_{DD}(r)$ 은 섭동으로 처리된 쌍극자간 상호작용 포텐셜, $U'_{LJ}(r)$ 은 Lennard-Jones 포텐셜 함수의 분자간 거리 r 에 대한 미분값, 그리고 e 는 기체의 밀도를 나타낸다. 식 (4)를 보면 YHB 동경분포함수의 섭동의 세기는 $U_{DD}(r)$ 에 직접적으로 비례한다는 것을 쉽게 알 수 있다.

3. 결과 및 고찰

3.1. Lennard-Jones 분자의 동경분포함수

CO 분자의 YHB 동경분포함수를 계산할 때 기준 동경분포함수로 사용되는 Lennard-Jones CO 분자의 동경분포함수는 BH 섭동법을 해석학적으로 다루어 Yoon, Hacura, Baglin이 유도한 형식인 식 (5)를 사용하였다[7].

$$g_{LJ}(r) = g_H(r) \left[1 - \beta \frac{U_{LJ}(r)}{1 + 4\pi\beta e d^3 g_H(d)} \right] \tag{5}$$

식 (5)에서 $g_H(r)$ 은 hard sphere 기준 동경분포함수를 나타내며 d 는 기준 hard sphere의 직경을 나타낸다. 한편, 기준 hard sphere의 직경은 다음 BH식[6]에 따라 계산하였다.

$$d = \int_0^{r_{min}} [1 - \exp(-\beta U_{LJ}(r))] dr \tag{6}$$

식 (6)에서 r_{min} 은 Lennard-Jones 포텐셜이 최소가 되는 지점의 분자간 거리를 나타낸다. 계산에 사용한 Lennard-Jones 인자는 문헌에 나타난 $\sigma = 3.706 \text{ \AA}$ 과 $\epsilon = 1.215 \times 10^{-14} \text{ erg}$ 를 그대로 사용하였다[2]. 계산된 hard sphere 직경은 Table 1에 나타내었다.

Table 1의 273, 298, 그리고 373 K에서 계산된 CO 기체분자의 기준 hard sphere 직경은 운동직경으로 알려진 Lennard-Jones 포텐셜 인자 σ 보다 약 0.2 Å 정도 감소 했으며 온도가 증가할수록 조금씩 더 그 감소치가 증가하는 경향을 보이고 있다. 앞에서 조사한 사중극자 분자인 C_2H_4 나 CO_2 분자의 경우와 비교하면 그 감소치는 약 0.1Å 더 증가한 수치이다. 이는 쌍극자 분자인 CO가 사중극자 분자인 C_2H_4 나 CO_2 분자보다 분자간 척력이 작용하는 단거리 지역에서 더 무른 핵을 가지고 있다는 증거라 할 수 있다. 다시 말하면, 분자간 척력이 주된 작용을 하는 단거리 지역에 침투할 수 있는 정도가 CO가 사중극자 분자들보다 더 크다고 할 수 있다. 이러한 단거리 지역으로의 침투는 분자의 운동에너지를 그 추진 에너지로 하고 있다. 따라서, 온도가 증가할수록 그 단거리 지역의 침투가 증가하는 경향, 즉, 기준 hard sphere의 직경이 조금씩 감소하는 현상은 온도가 증가할수록 CO 기체분자의 운동에너지가 증가하기 때문이라 할 수 있다.

Table 1의 hard sphere 직경을 이용하여 298K에서 계산한 밀도 변화에 따른 Lennard-Jones CO 분자의 동경분포함수의 변화를 Figure 1에 도시하였다.

Figure 1의 Lennard-Jones CO 기체분자의 밀도 변화에 따른 동경분포 함수의 변화를 조사해 보면 저밀도에서는 나타나지 않는 동경분포함수의 구조가 밀도가 증가함에 따라 분자간 거리가 1~5

Table 1. Temperature Dependent Hard-Sphere Diameter of CO Molecule

Temperature (K)	Diameter (Å)
273	3.498
298	3.488
373	3.459
473	3.427

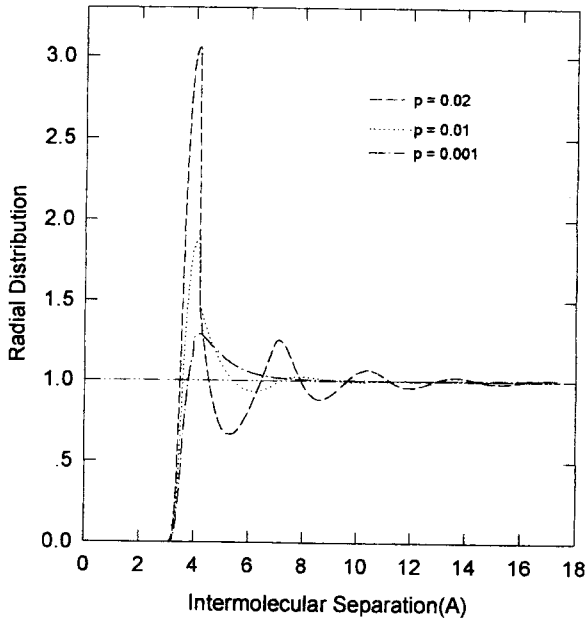


Figure 1. Density dependence of CO Lennard-Jones radial distribution function at 298 K.

배의 분자직경 범위내에서 따라 점차 뚜렷하게 나타난다. 밀도가 증가할수록 동경분포는 전체적으로 증가하며 특히 hard sphere 직경과 일치하는 분자간 거리 약 3.5 Å 부근의 첫 번째 봉우리와 약 7 Å 부근의 두 번째 봉우리 부근에서 동경분포는 다른 지역 보다 더욱 급격히 증가하고 있다. 이는 밀도가 증가함에 따라 분자간 평균거리가 감소하여 인력이 가장 크게 작용하는 Lennard-Jones 장거리 지역에서 분자의 밀도가 더욱 커진다는 것을 나타낸다. 한편, Figure 1의 모든 동경분포함수에서 hard sphere 직경 3.5 Å보다 짧은 거리에서도 0보다 큰 값의 동경분포 값이 나타나는데 이는 Lennard-Jones 분자가 분자간 단거리 및 장거리 상호작용을 할 수 있는 무른 중심핵을 가지고 있기 때문이다.

3.2. CO 기체분자의 YHB 동경분포함수

방향성이 없는 Lennard-Jones 포텐셜을 기준으로 하여 선형인 CO분자에 존재하는 영구 쌍극자간 상호작용을 섭동으로 취급한 CO 기체분자의 YHB 동경분포함수는 식 (4)를 이용하여 계산하였다. 이 계산에서 CO 분자의 영구 쌍극자 값은 문헌치 범위 내의 값인 0.112×10^{-18} esu cm로 하여 사용하였다[12]. 298 K에서 계산된 CO 기체분자의 밀도 변화에 따른 YHB 동경분포함수의 변화를 Figure 2에 도시하였다. CO 기체 반응 조건의 범위에 드는 475 K, 250 atm($e = 0.0035 \text{ Å}^3$)에서의 YHB 동경분포함수는 비교를 위해 같은 조건에서의 Lennard-Jones 동경분포함수와 함께 Figure 3에 도시하였다.

Figure 2의 CO 기체분자의 YHB 동경분포함수 역시 밀도가 증

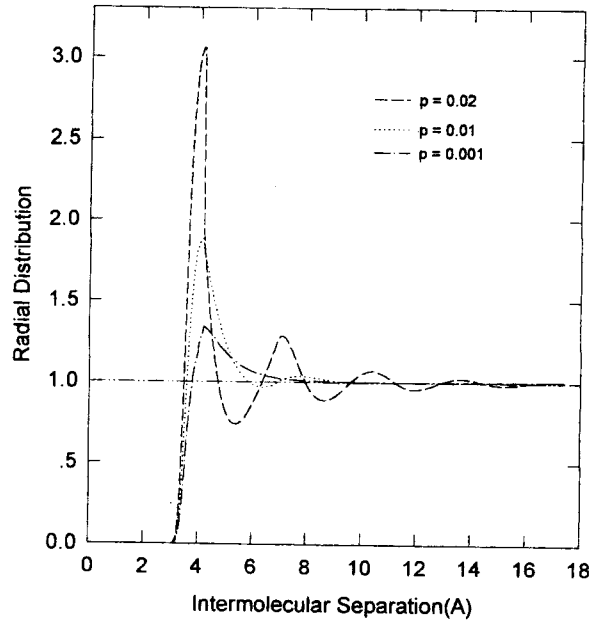


Figure 2. Density dependence of CO YHB radial distribution function at 298 K.

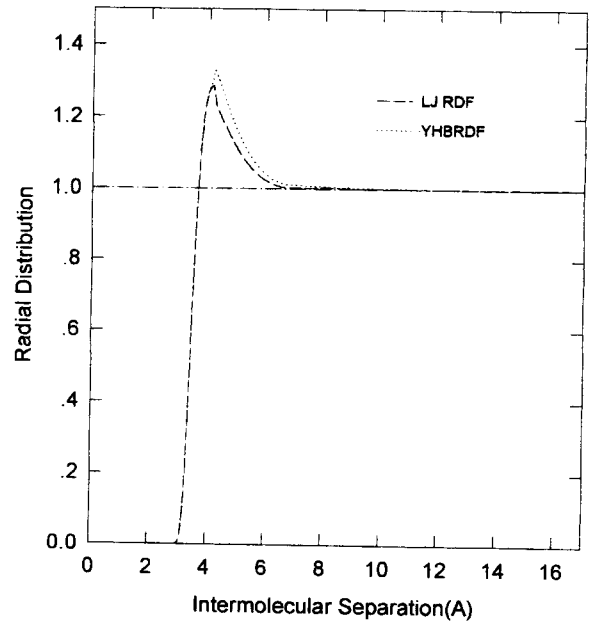


Figure 3. Density dependence of CO radial distribution functions at $T = 298K$, $e = 0.0035 \text{ Å}^3$ ($p = 255 \text{ atm}$).

가함에 따라 점차적으로 동경분포구조가 뚜렷이 나타나며 전체적인 경향은 Figure 1의 Lennard-Jones 동경분포함수의 경우와 같다. 그러나 Figure 1과 Figure 2를 자세히 비교해 보면 조사된 모든 밀도에서 YHB 동경분포가 Lennard-Jones 동경분포 보다 분자 직경의 약 2.5배의 범위 (분자간 거리 약 8 Å)내에서 YHB 동경분포가 더 크다는 것을 알 수 있다. 이는 CO 분자의 쌍극자간 상호작용이 인력으로 작용하였기 때문이다. 특히 분자간 거리 약 8 Å까지의 기준분자와 인접한 지역에서 동경분포가 더 크게 증가했다는 것을 나타내며 CO 분자의 쌍극자간 인력은 분자직경의 약 2.5배 범위까지 효과적으로 작용한다는 것을 뜻한다. 앞서 조사된

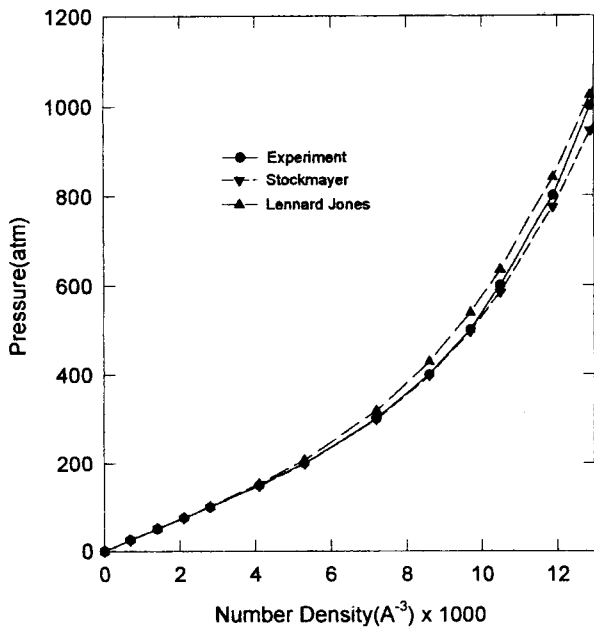


Figure 4. Density dependent pressures of CO at 273 K.

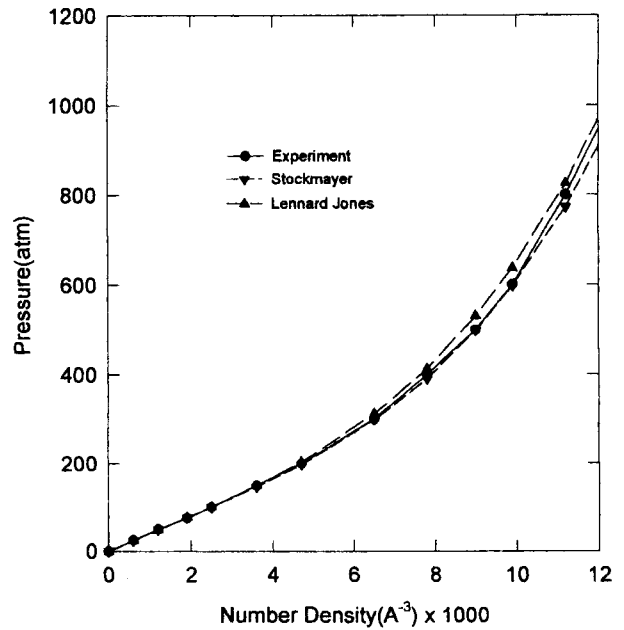


Figure 5. Density dependent pressures of CO at 298 K.

사중극자 분자인 C₂H₄의 경우 분자직경의 약 2배까지 사중극자간 인력이 효과적으로 작용하는 것과 비교하면 쌍극자간 상호작용이 사중극자간 상호작용 보다 더욱 장거리까지 작용한다는 것을 알 수 있다. Figure 3의 CO 기체 반응 조건의 범위에 드는 298 K, 250 atm의 YHB 동경분포를 조사해 보아도 마찬가지로 쌍극자간 상호작용은 분자직경의 약 2.5배까지 그 영향을 미친다는 것을 알 수 있다. 이렇게 쌍극자간 상호작용이 미치는 범위를 알 수 있다는 것은 쌍극자간 상호작용이 그 영향을 미치는 범위내에서 일어나는 흡착, zeolite나 활성탄과 같은 3차원 고체 동공내의 기체 encapsulation 등의 각종 물리 화학적 현상의 규명에 이러한 YHB 동경분포함수가 중요하게 사용될 수 있다는 것을 뜻한다.

3.3. 밀도변화에 따른 CO 분자의 압력

앞에서 얻어진 CO 기체분자의 Lennard-Jones, 그리고 YHB 동경분포함수의 신뢰성을 조사하기 위해 조사된 온도 및 밀도에서의 CO 기체의 압력을 계산해 보았다. 앞에서 언급한 것과 같이 기체의 압력은 온도와 밀도의 변화에 민감한 동경분포함수의 효과가 가장 극적으로 나타나는 물리량 중의 하나이므로 밀도 변화에 따른 압력 변화와 같은 계산은 얻어진 동경분포함수의 신뢰성 검증에 절대적으로 필요하다고 할 수 있다. 밀도변화에 따른 기체의 압력은 통계역학적으로 정의된 아래의 압력식을 사용하였다[5].

$$\beta p = e - e^2 \beta / 6 \int_0^\infty r U''(r) g(r) 4\pi r^2 dr \quad (7)$$

식 (7)에서 p는 압력을 나타낸다. 식 (7)의 압력 식을 사용하여 계산한 CO 기체의 273, 298, 그리고 373 K에서의 CO 기체분자의 밀도 변화에 따른 압력변화를 Figure 4~6에 나타내었으며, 신뢰성 조사를 위해 문헌에 나타난 CO 압력의 실험치[15]와 함께 도시하였다.

Figure 4~6의 Lennard-Jones와 YHB 동경분포함수로 계산한 CO의 밀도변화에 따른 압력변화 곡선들은 두 경우 다 문헌에 나타난 CO 기체 압력변화 실험치와 조사한 모든 온도 및 밀도 범위 내에서 잘 일치하고 있으며, YHB 동경분포함수로 계산한 압력곡

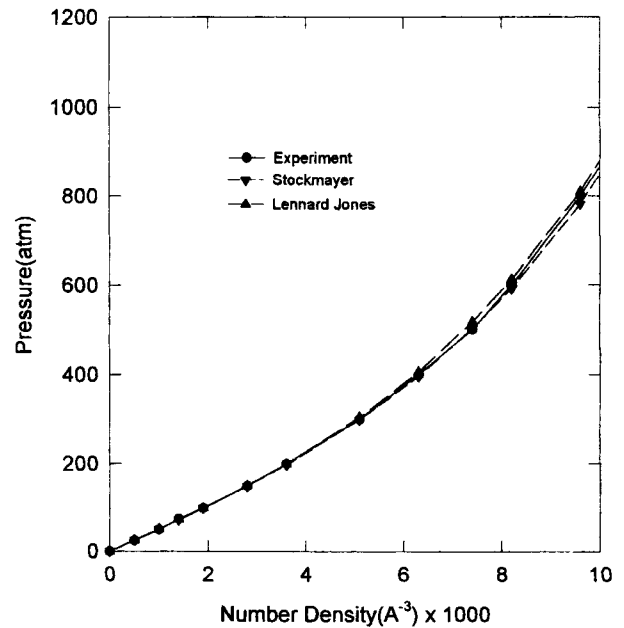


Figure 6. Density dependent pressures of CO at 373 K.

선이 전체적으로 실험치와 더욱 잘 일치하는 경향을 나타내고 있다. 이러한 경향은 YHB 동경분포함수 형식에 포함된 CO 분자간 약 2.5 분자직경의 범위내에서 효과적으로 영향을 미치는 CO 영구 쌍극자간 상호작용(이 경우 인력)이 CO 기체의 압력계산에서 보정항으로 작용하여 전체적으로 CO의 압력을 Lennard-Jones 동경분포함수로 계산한 것 보다 낮추어 주었기 때문이라고 생각된다. 결론적으로, 본 연구에서 얻은 CO 분자의 YHB 동경분포함수가 조사된 모든 온도 및 밀도 범위에서 CO 분자의 압력과 같은 밀도에 민감한 평형성질들을 신뢰성있게 계산할 수 있다고 말할 수 있다. 보다 확장하여 말한다면 YHB 동경분포함수는 C₂H₄와 같은 사중극자 분자뿐만 아니라 CO와 같은 쌍극자 분자의 경우에도 넓은

온도 및 밀도 범위에서 신뢰성 있게 사용할 수 있다고 할 수 있으며, 특히 앞에서 언급한 아직 완전하게 규명이 되지 않은 zeolite나 활성탄내 분자 흡착 및 encapsulation 현상과 같이 약 2~3 분자직경내의 정전기적 상호작용과 같은 근거리 상호작용이 중요한 역할을 하는 현상을 다룰 때 중요하게 사용할 수 있으리라고 믿어진다.

한편, 고밀도 지역에서 YHB 동경분포함수로 계산한 CO의 압력이 실험치보다 다소 낮아지는 이유는 사용한 CO 분자의 영구 쌍극자값이 고밀도에서는 실제 CO 분자의 쌍극자 값보다 다소간 과장되어 쌍극자간 상호작용에 의한 인력이 크게 계산되었기 때문이라 믿어진다. 본 연구에서는 사용한 CO 분자의 영구쌍극자 값을 분자의 밀도와 무관한 상수로 취급했으나, 실제로는 분자의 쌍극자도 밀도의 함수로 나타나며 고밀도로 갈수록 분자의 쌍극자 값은 그 크기가 약간씩 감소하는 경향이 있다고 알려져 있다. 실제로 분자의 모든 영구 다중극자들은 밀도에 따른 이러한 경향을 가지고 있으나 사중극자와 같은 쌍극자보다 고차 다중극자들은 쌍극자보다는 밀도의 영향을 적게 받는다고 알려져 있다[12].

마지막으로, 본 계산에 나타난 동경분포함수가 포함된 모든 적분식의 계산은 펜티움 프로세서를 사용한 개인용 컴퓨터를 이용하였으며 적분방법은 적분 간격을 0.01d로 한 trapezoidal법을 사용하였다.

4. 결 론

본 연구에서는 고온 고압의 조건하에서 주로 반응이 일어나는 CO 기체의 분자의 온도 및 밀도변화에 따른 YHB 동경분포함수를 273, 298, 그리고 373 K의 온도에서 밀도 약 0.013 Å(최대압력 약 1000 atm)까지 계산하고 CO의 압력을 계산하여 그 신뢰성을 조사하였다. 계산한 YHB 동경분포함수를 이용하여 구한 CO 기체의 압력변화 곡선들은 문헌에 나타난 CO 기체의 압력 실험치와 약 5%이내의 오차범위 내에서 잘 일치하고 있어서 조사된 모든 온도 및 밀도 범위내에서 YHB 동경분포함수는 쌍극자 분자인 CO 분자의 각종 물리 화학적 성질의 예측에 신뢰성있게 사용할 수 있는 것으로 나타났다. 또한, CO 분자의 YHB 동경분포함수를 분석해본 결과 CO 분자간 쌍극자간 상호작용은 분자직경의 약 2.5배의 범위 내에서 효과적으로 작용한다는 것을 알 수 있었다.

사 용 기 호

r : Intermolecular separation
 $U_{ST}(r)$: Stockmayer potential function
 $U_{LJ}(r)$: Lennard-Jones potential function
 $U_{DD}(r)$: Dipole-dipole interaction potential
 σ : Lennard-Jones kinetic diameter

ϵ : Lennard-Jones potential depth
 β : Reciprocal of the product of Boltzmann constant and temperature
 d : Reference hard sphere diameter
 r_{min} : Intermolecular separation at which Lennard-Jones potential minimum
 D : Molecular dipole moment
 $g(r)$: YHB radial distribution function
 $g_{LJ}(r)$: Lennard-Jones radial distribution function
 $g_H(r)$: Hard sphere radial distribution function
 e : Number density
 p : Pressure

참 고 문 헌

1. M. Grayson, "Kirk-Ohmer Encyclopedia of Chemical Technology", John Wiley & Sons, Ins., N.Y.(1978).
2. J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and B. B. Bird, "Molecular Theory of Gases and Liquids", John Wiley & Sons, Ins., N.Y.(1967).
3. J. F. Kanicky and C. J. Pings, *Adv. Chem. Phys.*, **64**, 4592 (1976).
4. R. A. Howe, in "Progress in Liquid Physics", C. J. Croxton Ed., John Wiley & Sons, Inc., N.Y.(1978).
5. D. A. McQuarrie, "Statistical Mechanics", Harper & Row, N.Y.(1973).
6. J. A. Barker and D. Henderson, *J. Chem. Phys.*, **47**, 2856 (1967).
7. J. H. Yoon, A. Hacura, and F. G. Baglin, *J. Chem. Phys.*, **91**, 5230(1989).
8. J. H. Yoon, H. W. Kim, *J. of Ind. & Eng. Chemistry*, **9**, 561(1998).
9. J. H. Yoon, *J. Phys. Chem.*, **97**, 6066(1993).
10. J. H. Yoon, M.W. Huh, *J. Phys. Chem.*, **98**, 3202(1994).
11. R. Pool, *Science*, **263**, 1698(1994).
12. G. Stell, J. C. Rasaiah, and H. Narang, *Mol. Phys.*, **27**, 1393 (1974).
13. G. J. Troop and R. J. Bearman, *J. Chem. Phys.*, **42**, 2408 (1965).
14. V. Verlet, *Phys. Rev.*, **A5**, 98(1972)
15. Landolt-Börnstein, 2 Band, 1 Teil, 6 Auflage, p. 151, (1971).