الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

رقم الترتيب:

رقم التسلسل:

جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي

كلية العلوم الدقيقة

قسم: الفيزياء

مذكرة تخرج مقدمة لنيل شهادة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

تخصص: فيزياء تطبيقية إشعاع وطاقة

من إعداد:

رابحي شيماء

زيدان نبيلة

الموضوع:

الديناميك الجزيئي والانتقال الطوري

نوقشت يوم: 28 \ 09 \ 2020

أمام لجنة المناقشة المكونة من الأساتذة:

ليتيم فتحي	أستاذ محاضر ب	رئيسا
بسر الزوبير	أستاذ مساعد أ	مناقشا
احميم رشيد	أستاذ محاضر ب	مؤطرا

الموسم الجامعي: 2019 \ 2020

الفهرس

إهداء **iii**

إهداء **iv**

شكر و عرفان **v**

قائمة الأشكال **vi**

قائمة الجداول **vii**

قائمة الرموز **viii**

قائمة المصطلحات العلمية **xi**

المقدمة العامة **2**

1 الديناميك الجزيئي **5**

1.1 تمهيد 5

2.1 مفهوم الديناميك الجزيئي 5

3.1 مجالات تطبيق محاكاة الديناميك الجزيئي 5

4.1 مقارنة بين التجربة في الواقع ومحاكاة الديناميك الجزيئي 5

5.1 شرح طريقة المحاكاة في الديناميك الجزيئي 6

1.5.1 معادلات الحركة 6

2.5.1 كمونات التفاعل 7

3.5.1 خوارزميات التفاضل العددي 10

2 الانتقالات الطورية **15**

1.2 تمهيد 15

2.2 الانتقال الطوري 15

1.2.2 مفهوم الطور 15

2.2.2 مفهوم الانتقال الطوري 15

3.2.2 مخطط الطور 15

3.2 دالة الانثالبي لجيبس 17

1.3.2 الحرارة الكامنة 17

4.2 تصنيف الانتقالات الطورية 18

1.4.2 تصنيف اهرنفست 18

2.4.2 تصنيف لاندو 18

5.2 أنواع الانتقالات الطورية 20

1.5.2 انتقال طوري من الدرجة الأولى 20

2.5.2 انتقال طوري من الدرجة الثانية 20
3.5.2 انتقال طوري لانهائي الدرجة 21
6.2 الانصهار 21
1.6.2 نقطة الانصهار 21
2.6.2 درجة حرارة الانصهار 22
7.2 الأسس الحرجة 23
8.2 العالمية 24

3 الانصهار والديناميك الجزيئي 26
1.3 تمهيد 26
2.3 كمون ليونارد جونس 26
3.3 الوحدات المختزلة 27
4.3 الشروط الحدودية الدورية 28
5.3 خوارزمية فرلات 29
6.3 محاكاة توزيع ماكسويل لغاز كلاسيكي ونتائجها العددية 30
1.6.3 وصف برنامج المحاكاة 31
2.6.3 النتائج العددية ومناقشتها 32
7.3 محاكاة ظاهرة الانصهار ونتائجها العددية 35
1.7.3 وصف برنامج المحاكاة 36
2.7.3 النتائج العددية ومناقشتها 36

الخلاصة العامة 40

المراجع 42

إهداء

إلى من علمني العطاء دون انتظار
إلى من أحمل اسمه بكل افتخار
إلى من تحمل وكدّ من أجل مستقبلي
إليك مصدر همتي -أبي الغالي-

إلى من أوصى بها الرحمن
إلى من منحتني العون والدفء والحنان
إلى من كان دعاؤها لي سرا وجهرا دعما وسندا لي
إليك شمعتي المضيئة -أمي الغالية-

إلى من حبهم يجري في عروقي ويبتهج عند ذكراهم فؤادي
إلى مشاطري أفراحي وأحزاني
إليكم رياحين حياتي -إخوتي الأعزاء-

إلى من لم يشعروني يوما أني أمشي على عجلات أربع إليك أنت -عائلتي- الأروع

إلى من ضاقت السطور عن ذكرهم فوسعهم قلبي ... إليكن يا من لاتفارقن الوجدان -صديقاتي-

نبيلة

إهداء

إلى من كساني رداء الخلق وحلّة الأدب
إلى من تعب وسهر الليالي ليقدم لي السعادة
إلى من شجعني ودفعني إلى درب الحياة
إلى رمز التضحية (أبي الغالي)

إلى الريحانة والوردة التي تعانق نفسي بأريجها الدائم
إلى من تراهن على صحتها في سبيل سعادتي ونجاحي
إلى الشمعة التي تحترق لتنير دربي
إلى رمز الحنان(أمي الغالية)

إلى بسمتي ومنار بهجتي إلى من هم سندي وعزوتي (إخوتي)

إلى من هم وطني وملجئي إلى من ترعرت وكبرت بينهم (عائلتي الكريمة)

إلى من جمعني بهم القدر وفرقتني عنهم الظروف ... إلى من أمضيت معهم أجمل الأوقات ... إلى جواهر قلبي ورفيقات دربي (صديقاتي)

شيمـاء

شكر و عرفان

الحمد لله حمدا يليق بجلال وجهه وعظيم سلطانه على توفيقه لنا على إتمام هذا العمل المتواضع،
والصلاة والسلام على صفوة الخلق أجمعين نبينا محمد،
وعلى آله وصحبه، ومن سار على نهجه... ومن اقتدى بسنته إلى يوم الدين.

نتقدم ببالغ الشكر الجزيل والعرفان الجميل إلى الذي أنارنا بإشرافه على هذه المذكرة
الأستاذ الفاضل "احميم رشيد"، وعلى ماقدمه لنا من نصح وإرشاد وتوجيه
ومتابعة مكثفة طوال فترة إعدادها دون كلل أو ملل، فجزاه الله كل الخير وجعله في خدمة العلم والوطن.

كما أن الشكر موصول للأساتذة الكرام أعضاء لجنة المناقشة الأستاذ "ليتيم فتحي" رئيسا، والأستاذ "بسر الزوبير" مناقشا
لتفضلهم بقبول مناقشة هذه المذكرة
ونأمل أن تكون ملاحظاتهم القيمة نبراسا لنا لكي نرقى بها إلى أرفع الدرجات العلمية.

كما نتقدم بأسمى عبارات التقدير والامتنان إلى الأستاذ الفاضل "بسر الزوبير" لما قدمه لنا من مساعدة
ونصائح قيمة، كما نشكره على سعة صبره معنا في كل ما احتجناه لإنجاز هذه المذكرة.

وفي هذا المقام لا يمكن أن ننسى شكر أساتذة قسم الفيزياء كل باسمه، ولكل من قدم لنا يد العون من أساتذة وأهل وأصدقاء
ولو بكلمة طيبة.

وإلى كل من سقط من قلمنا سهوا.

قائمة الأشكال

1.1 كمون ليونارد جونس LJ. 8

1.2 المخطط الطوري للماء $P-T$. 16
2.2 المخطط الطوري للماء $P-V$ 17
3.2 الاختلافات التخطيطية بين وسيطي الترتيب كدالة لدرجة الحرارة 18
4.2 السلوك النوعي للمغنطة 19
5.2 دورة التلاكؤ 21
6.2 منحنى الطاقة الحرة لعنصر نقي 22

1.3 الشروط الدورية الحدودية. 28
2.3 مسار الذرات. 32
3.3 توزيع السرعة v لـ 100 ذرة في زمنين مختلفين. 33
4.3 توزيع السرعة v للذرات. 33
5.3 توزيع مركبات السرعة v_x و v_y للذرات. 34
6.3 النتائج التحليلية لمختلف توزيعات السرعة. 34
7.3 توزيع السرعة v للذرات بحالتين ابتدائيتين مختلفتين للسرعة. 35
8.3 تكوين الحالة الصلبة للنظام. 37
9.3 تطور درجة الحرارة خلال عملية الانصهار بمعامل زيادة $R = 1.5$. 37
10.3 الانتقال من الطور الصلب إلى الطور السائل. 38
11.3 تطور درجة الحرارة خلال عملية الانصهار بمعامل زيادة $R = 1.1$. 39
12.3 تموضع الذرات داخل النظام خلال الزيادة في السرعة بمعامل $R = 1.1$. 39

قائمة الجداول

1.2 الأسس الحرجة الأساسية للانتقال فيرومغناطيسي-بارامغناطيسي 23
2.2 الأسس الحرجة الأساسية للانتقال سائل-غاز 23

قائمة الرموز

L دالة لاغرانج.

q_i الإحداثية المعممة للذرة i.

$\dot{q}_i$ السرعة المعممة للذرة i.

$\ddot{q}_i$ التسارع المعمم لذرة i.

Φ دالة الكمون الكلية للنظام.

ϕ دالة الكمون لذرة واحدة في النظام.

m كتلة الذرة الواحدة.

$\overrightarrow{F_i}$ القوة المطبقة على الذرة i.

$\overrightarrow{r_i}$ شعاع الموضع للذرة i.

$\overrightarrow{r_{ij}}$ المسافة بين ذرتين i و j.

$\overrightarrow{a_i}$ شعاع التسارع للذرة i.

σ المسافة التي يكون فيها كمون ليونارد جونس يساوي إلى الصفر.

ϵ القيمة المطلقة للحد الأدنى لكمون ليونارد جونس.

r_m موضع الحد الأدنى لكمون ليونارد جونس.

ϕ_{mn} كمون مي.

T درجة الحرارة.

T_c درجة الحرارة الحرجة.

T_t درجة حرارة النقطة الثلاثية.

P الضغط.

P_c الضغط الحرج.

P_t ضغط النقطة الثلاثية.

V	الحجم.
ρ_l	كثافة السائل.
ρ_g	كثافة الغاز.
G	دالة النثالبي لجيبس.
S	الأنتروبي.
ΔQ_L	الحرارة الكامنة.
B	الحقل المغناطيسي.
B_c	الحقل المغناطيسي القسري.
M	المغنطة.
M_∞	مغنطة التشبع.
M_R	المغنطة المتبقية.
F_s	الطاقة الحرة للطور الصلب.
F_l	الطاقة الحرة للطور السائل.
E_s	الطاقة الداخلية للطور الصلب.
E_l	الطاقة الداخلية للطور السائل.
S_s	أنتروبي الطور الصلب.
S_l	أنتروبي الطور السائل.
T_m	درجة حرارة الانصهار.
C	السعة الحرارية.
χ_T	الحساسية المغناطيسية عند درجة حرارة ثابتة.
ξ	طول الارتباط.
$\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$	الأسس الحرجة.
K_T	الانضغاطية عند درجة حرارة ثابتة.
C_V	السعة الحرارية عند حجم ثابت.

الاختصارات

MD	الديناميك الجزيئي	*Molecular Dynamics*
LJ	ليونارد جونس	*Lennard Jones*
$RK2$	رونج كوتا 2	*Runge Kutta* 2

قائمة المصطلحات العلمية

الديناميك الجزيئي	*Molecular dynamics*
كمون بين الذرات	*Inter − atomic potential*
متروبوليس	*Metropolis*
ألدر	*Alder*
وينرايت	*Wainright*
رحمان	*Rahman*
ستيلنجر	*Stillinger*
صياغة لاغرانج	*Lagrangian*
الطبقات المغلقة للذرات	*Closed − Shell atoms*
كمون ليونارد جونس	*Lennard − Jones potential*
كمون مي	*Mie potential*
كمون mn ليونارد جونس	*mn Lennard − Jones potential*
كمون بورن ماير	*Born − Mayer potential*
فان دير فالس	*Vander − Waals*
كمون مورس	*Morse potential*
خوارزمية أولر	*Euler algorithm*
خوارزمية أولر كرومر	*Euler − Cromer Algorithm*
خوارزمية فرلات	*Verlet algorithm*
خوارزمية رونج كوتا 2	*Runge − Kutta 2 algorithm*
انتقال طوري	*Phase transition*
مخطط الطور	*Phase diagram*
النقطة الثلاثية	*Triple point*
النقطة الحرجة	*Critical point*

Latent heat	الحرارة الكامنة
Ordre parameter	وسيط الترتيب
Symmetry breaking	كسر التناظر
Melting transition	الانتقال الانصهاري
Meling point	نقطة الانصهار
Ehrenfest	اهرنفست
Landau	لاندو
Weiss	وايس
Lindemann	ليندمان
Ferromagnetic	الفيرومغناطيسية
Paramagnetic	البارامغناطيسية
Hysteresis cycle	دورة التلاكؤ
Critical exponents	الأسس الحرجة
Universality	العالمية
Maxwell Distribution	توزيع ماكسويل
Equipartion theorem	نظرية التوزيع المتساوي

المقدمة العـــامة

المقدمة العامة

الفيزياء الحاسوبية هي مجال من مجالات العلوم الحاسوبية، تقوم بدمج عناصر من الفيزياء (خاصة النظرية) مع عناصر من الرياضيات (على وجه الخصوص الرياضيات التطبيقية كالتحليل العددي) بالإضافة إلى عناصر من العلم الحاسوبي (البرمجة)لتأمين حلول المسائل الفيزيائية. تقليديا هناك نهجان مندرجان في الفيزياء هما: (1) النهج التجريبي و(2) النهج النظري، وفي الوقت الحاضر يمكن اعتبار النهج الحاسوبي كنهج ثالث مستقل عن النهجين السابقين وليس مجرد جسر يربط بينهما. إن أهم استخدام للحواسيب في الفيزياء هو المحاكاة. فالمحاكاة معدة للمسائل غير الخطية التي لا يمكن حلها عموما بالطرق التحليلية، نقطة الانطلاق فيها هي دراسة نموذج مثالي لجملة فيزيائية ذات أهمية للتحقق ما إذا كان تصرف هذا النموذج متوافق مع المشاهدة أم لا [1]. تعتبر المحاكاة تجربة افتراضية مكملة للتجارب التقليدية على أرض الواقع ، كما أنها تعطي القدرة على تعلم شيء جديد لا يمكن إيجاده بالطرق الأخرى [2].

تلعب المحاكاة العددية في إطار الفيزياء الحاسوبية دورا هاما في توفير نتائج مهمة للمسائل التي لا يمكن حلها إلا بالتقريب وكذلك المسائل المستعصية تماما [3]. فالهدف الأساسي من إجراء المحاكاة هو فهم خصائص النظام والتفاعلات الميكروسكوبية التي تحدث بين مكوناته [2]. هناك طريقتان رئيسيتان للمحاكاة العددية: طريقة تحديدية وهي طريقة الديناميك الجزيئي وطريقة احتمالية وهي طريقة مونتي كارلو. ولدت المحاكاة عام 1950م بعد ظهور أجهزة الكمبيوتر الأولى، وتم تنفيذ أول محاكاة للسائل بواسطة متروبوليس عن طريق إدخال طريقة مونتي كارلو [3]. في حين أن أول من تقدم بطريقة محاكاة الديناميك الجزيئي هما العالمان ألدر و وينرايت عام 1959م، بهدف دراسة نظام من الكرات الصلبة [4,2]. بعدها ولأول مرة قام العالم رحمان بمعالجة الكمون الحقيقي للأرغون السائل باستخدام هذه المحاكاة سنة 1964م . وأجريت أول محاكاة للجزيئات لنظام حقيقي (الماء السائل) من طرف رحمان و ستيلنجر عام 1974م. وبعد ذلك أصبحت هذه المحاكاة تطبق بشكل شامل في عدة دراسات [2].

تعتمد محاكاة الديناميك الجزيئي على التفاعلات التي تتم على المستوى الذري والتي نصل من خلالها إلى الوصف الذي يمكن الوصول إليه على مستوى المخبر الحقيقي. بحيث نبدأ باختيار كمون التفاعل الذي بواسطته يتم الحصول على القوى العاملة بين الجزيئات والذرات، فينتج عنها قيم حقيقية تصف أهم خصائص النظام المدروس. تستخدم طريقة الديناميك الجزيئي للحصول على حلول للمعادلات التفاضلية للحركة، فنصل نتيجة ذلك إلى معلومات من الصعب الوصول إليها بالطرق التقليديةالاحصائية للأنظمة الذرية الميكروسكوبية. إن المسألة المهمة في الديناميك الجزيئي هي اختيار الكمون المناسب لشرح هذا التفاعل، والذي يحتاج إلى تعريف دالة الكمون التي تعطي وصفا لطبيعة القوى الفاعلة في النظام. حيث أن هناك الكثير من الكمونات المستعملة في محاكاة الديناميك الجزيئي، لكن سنكتفي في هذه الدراسة بذكر بعض الكمونات الثنائية البسيطة للذرات والجزيئات. إذن فإن هذه الطريقة تتغلب على المشاكل والصعوبات التي تواجهها الطرق التقليدية عند محاولة نمذجة التفاعلات الكيميائية [2].

إن الانتقال الطوري من أهم الظواهر الفيزيائية التي تدرس في إطار الفيزياء الإحصائية، ويعد هذا المجال معقد لكنه مهم لفهم الانتقالات التي تواجهنا في الحياة اليومية [5]. في الواقع فإن الوصف النظري لمثل هذه الانتقالات صعب جدا لذلك

فإنه يتم اللجوء إلى استعمال الحلول العددية فيها [7]. ففي هذه الدراسة سوف تستخدم محاكاة الديناميك الجزيئي للتحقق من الانتقال الانصهاري، والتي تعد الخيار الأمثل من أجل تقديم وصف كمي لهذه الظاهرة [4].

الهدف الرئيسي من تقديم هذه المذكرة هو إعطاء وصف كامل ومفصل قدر الإمكان لطريقة محاكاة الديناميك الجزيئي، ومحاولة فهم الأحداث والظواهر التي تحدث في نظام ما خلال عملية الانصهار عن طريق معالجته بواسطة هذه المحاكاة، بالإضافة إلى دراسة كيفية اقتراب غاز نحو حالة التوازن.

وقد نظمت سيرورة الدراسة حسب ثلاثة فصول يمكن سردها كالتالي:

- تم تخصيص الفصل الأول لدراسة ووصف محاكاة الديناميك الجزيئي، باستعراض مفهومه ومجالات تطبيقه وشرح المراحل المتبعة في طريقة المحاكاة به، مع ذكر كمونات التفاعل الممكن استخدامها، وكذلك خوارزميات التفاضل العددي المحتمل العمل بها.
- يهتم الفصل الثاني بدراسة الانتقالات الطورية من خلال التطرق لبعض المفاهيم الأساسية فيها ، وطرق تصنيفها وكذا أنواعها.
- أما في الفصل الثالث و الأخير سيتم التطرق إلى الديناميك الجزيئي عن طريق بناء برنامج بلغة الفورتران يحاكي ظاهرتين فيزيائيتين، الأولى تخص توزيع السرعات لغاز كلاسيكي وكيفية اقترابه من حالة التوازن الحراري، أما الثانية فهي ظاهرة الانتقال الانصهاري الذي يتم من خلال الزيادة في درجة الحرارة عن طريق الزيادة في سرع ذرات النظام.

الفصل الأول

الديناميك الجزيئي

الفصل 1

الديناميك الجزيئي

1.1 تمهيد:

تستند نمذجة المادة على المستوى المجهري إلى وصف شامل للجزيئات أو الذرات المكونة لها، فمن حيث المبدأ يجب أن يعتمد هذا الوصف على ميكانيكا الكم، في حين أن محاكاة الديناميك الجزيئي تعتمد عموما على وجهة نظر كلاسيكية في وصف مسار الجزيئات المكونة للمادة وطبيعة حركتها، وكذلك الأحداث والظواهر التي تحدث داخل هذه المادة على المستوى المجهري [8]. حيث سيتم في هذا الفصل إعطاء نظرة مفصلة قدر الإمكان على محاكاة MD.

2.1 مفهوم الديناميك الجزيئي:

الديناميك الجزيئي عبارة عن شكل من أشكال محاكاة الحاسوب، يسمح للذرات والجزيئات بالتفاعل لفترة زمنية في ظل قوانين الفيزياء، ويتم تتبع تطور مجموعة الجزيئات المتفاعلة مع الزمن ومن ثم تكامل معادلات حركتها. وتبنى هذه الطريقة على القانون الثاني لنيوتن أو معادلات لاغرانج للحركة [2].

3.1 مجالات تطبيق محاكاة الديناميك الجزيئي:

الديناميك الجزيئي هو أداة شائعة الاستخدام لمحاكاة الخواص البنيوية والترموديناميكية للأنظمة. حاليا، يتم استخدامها على نطاق واسع في مختلف مجالات الفيزياء والكيمياء خاصة في علوم المواد (البوليميرات، الكربيدات المائية، السوائل المعقدة...)، وقد وصلت إلى مجال البيولوجيا والمستحضرات الصيدلانية [9,3].

4.1 مقارنة بين التجربة في الواقع ومحاكاة الديناميك الجزيئي:

تشبه عملية محاكاة MD في كثير من النواحي التجارب الحقيقية. فالنهج المتبع في إجراء التجربة الحقيقية هو:

1. إعداد عينة من المواد المراد دراستها.
2. توصيل هذه العينة بأداة قياس (مثل مقياس الحرارة، مقياس الضغط، مقياس اللزوجة).
3. قياس الكمية المراد معرفتها خلال فترة زمنية معينة.

إذا كان القياس يخضع لضوضاء إحصائية (كما هو الحال في معظم القياسات)، فكلما زاد متوسط الوقت أصبح القياس أكثر دقة.

في محاكاة MD يتم اتباع نفس النهج بالضبط:

1. القيام بإعداد نموذج: اختيار نظام نموذجي يتكون من N جسيم.
2. حلول معادلات الحركة لهذا النظام حتى لا تتغير خصائص النظام مع مرور الوقت (توازن النظام).
3. بعد التوازن يتم إجراء القياس الفعلي.

في الواقع فإن بعض الأخطاء الأكثر شيوعا التي يمكن ارتكابها عند إجراء محاكاة حاسوبية تشبه إلى حد بعيد الأخطاء التي يمكن ارتكابها في تجارب حقيقية على سبيل المثال: لم يتم إعداد العينة بشكل صحيح، مدة القياس قصيرة للغاية، خضوع النظام لتغيير لا رجعة فيه أثناء التجربة، أو أن القياس لا يتم على الكمية المراد دراستها (عدم القدرة على التعبير على هذه الخاصية بدالة رياضية) [10]. لذلك أصبحت محاكاة MD الأداة الشائعة لدراسة التركيب والخصائص الترموديناميكية للجزيئات الحيوية [2].

5.1 شرح طريقة المحاكاة في الديناميك الجزيئي:

تتم المحاكاة في MD بتجهيز العينة أي بناء نموذج للنظام، بحيث يتم تعيين المتغيرات التي تصف ظروف التجربة مثل: درجة الحرارة الإبتدائية، عدد الجسيمات، الكثافة والخطوة الزمنية. بعدها يتم اختيار المواضع والسرعات الإبتدائية للجسيمات، بعد ذلك يأتي الجزء الأكثر استهلاكا للوقت في هذه المحاكاة وهو حساب القوى المؤثرة على الجسيمات بمعرفة الكمون بين الذرات. من معرفة القوة المطبقة على كل ذرة يمكن تعيين تسارعها في النظام. ويؤدي تكامل معادلات الحركة إلى حلول عددية تمكننا من الحصول على المواضع والسرعات والتسارعات للأجسام كلما تغيرت مع الزمن. وتصبح محاكاة MD طريقة تحديدية طالما علمت المواضع والسرعات لكل ذرة. ويمكن التنبؤ بحالة النظام عند أي وقت في المستقبل من خلال حالته الحالية [2].
فيما يلي تفصيل لهذه الطريقة وشرح للكمونات والخوارزميات المتبعة في هذه المحاكاة.

1.5.1 معادلات الحركة:

أثناء خطوة زمنية في محاكاة MD، يتم حساب القوى على كل ذرة بسبب تفاعلها مع الذرات الأخرى حيث يتم تحريك الذرات أو رسم مسارها المستقبلي من خلال تكامل معادلات الحركة [9].
هناك عدة طرق لحل هذه الأخيرة، نقطة الانطلاق فيها تكون من مكاملة المعادلات الكلاسيكية لحركة نظام يتكون من N جسيم. بالنظر إلى مجموعة الاحداثيات والسرعات المعممة المستقلة $\{q_i, \dot{q}_i\}$ التي تصف حالة النظام المحافظ (كل قوة في النظام تشتق من دالة كمون Φ)، يمكن كتابة معادلات لاغرانج من الشكل:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \qquad (1.1)$$

حيث: $i = 1, ..., N$
بافتراض أن جميع الذرات متماثلة تكتب صيغة لاغرانج بالشكل:

$$L = \frac{1}{2} m \sum_i \dot{q_i}^2 - \Phi(\{q_i\}) \qquad (2.1)$$

تصبح المعادلة (1.1):

$$m\ddot{q}_i = -\frac{\partial \phi}{\partial q_i} = f_i \qquad (3.1)$$

حيث: f_i هي مركبة القوة المقابلة للاحداثية q_i [8].
إن قانون نيوتن الثاني هو نتيجة بسيطة لهذه المعادلات، حيث يُوصَف النظام من خلال المعادلة:

$$\overrightarrow{F_i}(r_i(t)) = m\frac{d^2\overrightarrow{r_i}(t)}{dt^2} = m\overrightarrow{a_i} \tag{4.1}$$

حيث:
m: كتلة كل ذرة .
$\overrightarrow{F_i}$: القوة المطبقة على الذرة i.
$\overrightarrow{r_i}$: شعاع الموضع للذرة i.
$\overrightarrow{a_i}$: شعاع التسارع للذرة i.
في حالة وجود كمون بين كل ذرتين، يتم كتابة العبارة التحليلية للقوة التي تطبق على كل ذرة كما يلي:

$$\overrightarrow{F_i} = -\sum_j \overrightarrow{\nabla}\phi(\overrightarrow{r_{ij}}) \tag{5.1}$$

حيث:
$\overrightarrow{r_{ij}}$: المسافة بين ذرتين i و j [11].
إن اختيار كمون التفاعل يتم انطلاقا من الظاهرة المدروسة وهذا الأخير يدخل في تحديد الصيغة الرياضية للمسألة [12].

2.5.1 كمونات التفاعل:

كما ذكر في مقدمة هذا الفصل لمعرفة سلوك الجسيمات المكونة للمادة يجب أولا معرفة طبيعة التفاعلات المتبادلة بينها، ولحساب هذه الأخيرة تعتمد محاكاة MD على دوال كمون بسيطة وتقريبية تصف القوى التي تتفاعل بها هذه الجسيمات، على الرغم من أن جميع الحسابات تكون تقريبية، إلا أن دوال الكمون المعتمدة تمكن من وصف أنظمة أكبر بكثير في وقت أقل بكثير من الطرق التحليلية الأكثر دقة.
قبل التطرق إلى مجموعة الكمونات بين الذرية يجب معرفة أصل تفاعل الجسيمات. بافتراض وجود ذرتين i و j تتفاعلان فيما بينهما على مسافة $r_{ij} = \mid r_i - r_j \mid$ ، فإذا كانت r_{ij} صغيرة بما فيه الكفاية فإن الذرات تتصدى لبعضها البعض قبل أن تنهار المادة ويسمى هذا النوع بالتفاعلات قصيرة المدى أو قوى التنافر، والعكس إذا كانت r_{ij} كبيرة فإن الذرات تحاول أن تقترب لبعضها لكي تشكل مواد صلبة أو سائلة في ضغوط طبيعية وتسمى بالتفاعلات طويلة المدى أو قوى التجاذب.
يمكن صياغة التفاعلات قصيرة المدى بالشكل العام:

$$\phi(r) = Ae^{-\alpha r} \tag{6.1}$$

أما التفاعلات طويلة المدى فتنمذج بالعلاقة:

$$\phi(r) = -\frac{A}{r^6} \tag{7.1}$$

حيث: A و α هي ثوابت تتعلق بأنواع الذرات المتفاعلة [13].

-أ- كمون ليونارد جونس:

بسبب بساطته يشيع استخدام كمون ليونارد جونس في وصف ونمذجة التفاعلات بين الذرات، على الرغم من أنه تم تطويره لوصف التفاعلات بين الطبقات المغلقة للذرات والجزيئات، إلا أنه استخدم في نمذجة كل شيء تقريبا، بالإضافة إلى أنه يستخدم في حالات المادة الثلاث: الصلبة، السائلة والغازية.

كما ذكر سابقا فإن التفاعلات بين الذرات تعتمد على حدين أساسيين هما: قوى التجاذب وتمثل بالحد $-\frac{A}{r^6}$ ، بينما شكل التفاعلات قصيرة المدى لم تكن معروفة. عندما طورها ليونارد جونس افترض بأن جزء التنافر يجب أن يهيمن على جزء التجاذب ويتحلل بمعدل أسرع من r^{-6} في المدى البعيد. وللتسهيل أخذ حد التنافر الشكل $\frac{B}{r^{12}}$ حيث B هو أيضا ثابت بالنسبة للأنواع المتفاعلة. اختيار الأس 12 هو اعتباطي إلى حد ما، لكنه يؤدي إلى نموذج بسيط كالآتي:

$$\phi(r) = \frac{B}{r^{12}} - \frac{A}{r^6} \tag{8.1}$$

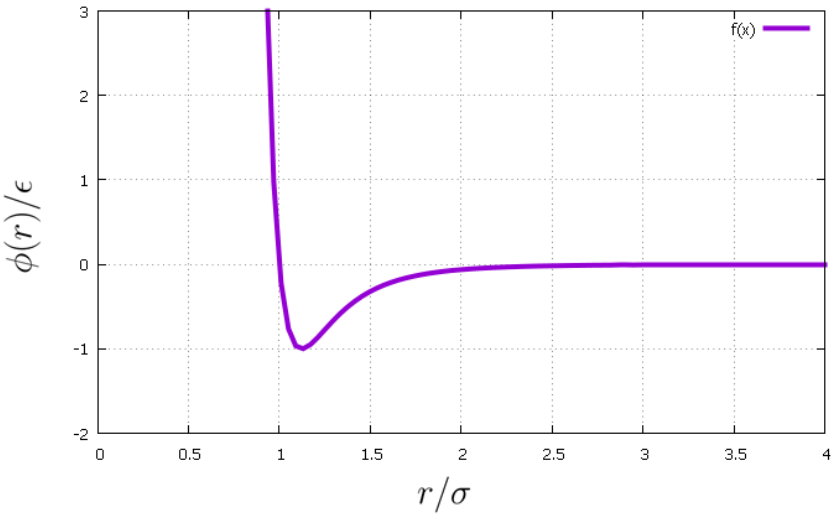
الحد $\frac{B}{r^{12}}$ يحاكي الحد الأسي في المعادلة (6.1).

وللتبسيط أكثر وجعل الكمون سهل الاستخدام عادة ما يتم كتابة كمون LJ في شكل أكثر فائدة من حيث الأبعاد ويعتمد على متغيرين مختلفين هما: σ وهي المسافة التي يكون فيها الكمون يساوي إلى الصفر ($\phi(\sigma) = 0$) وبالتالي: $\sigma = (B/A)^{\frac{1}{6}}$، و ϵ هي القيمة المطلقة للحد الأدنى للكمون: $\epsilon = A^2/4B$.

باستخراج قيمة A و B من قيمتي σ و ϵ وتعويضها في المعادلة (8.1) فيصبح شكل الكمون [13]:

$$\phi(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right) \tag{9.1}$$

والشكل (1.1) يمثل كمون LJ المنمذج بالمعادلة (9.1)



شكل 1.1: كمون ليونارد جونس LJ.

كما يمكن أيضا كتابة هذا الكمون بدلالة r_m بدلا من σ، حيث r_m يمثل موضع الحد الأدنى للكمون، ويتم الحصول عليه من خلال اشتقاق المعادلة(9.1) ومساواتها للصفر فينتج: $r_m = 2^{1/6}\sigma$ إذن يصبح الكمون من الشكل [13]:

$$\phi(r) = \epsilon \left(\left(\frac{r_m}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_m}{r}\right)^{6} \right) \tag{10.1}$$

ب- كمون مي:

يمكن إجراء تعديلات على كمون LJ من خلال جعل المتغيرات قابلة للتعديل، أي بدلا من الأس (-12) يمكن أن يكون الأس (-11) أو (-10) وبالتالي سيوفر وصف أفضل للتفاعلات في بعض الأنظمة. حيث يطلق على النموذج المعدل بكمون مي أو كمون mn ليونارد جونس، ويتم فيه استبدال الحد r^{-12} بالحد r^{-m} والحد r^{-6} بالحد r^{-n} ، فتصبح عبارة

كمون مي من الشكل:

$$\phi_{mn}(r) = \frac{\epsilon}{m-n}\left(\frac{m^m}{n^n}\right)^{\frac{1}{m-n}}\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^m - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^n\right) \quad (11.1)$$

وكما هو الحال في كمون LJ فإن $\phi_{mn}(\sigma) = 0$ و $\phi_{mn}(r_m) = -\epsilon$ حيث يقع الحد الأدنى في:

$$r_m = \left(\frac{m}{n}\right)^{\frac{1}{m-n}}\sigma$$

إذا كانت $m = 12$ و $n = 6$ يتم الحصول على كمون LJ الممثل في المعادلة (9.1).

يحقق كمون mn نتائج أفضل إلى حد ما لبعض الأنظمة كما هو الحال في المعادن، فعلى سبيل المثال يتم أخذ $m = 10$ بدلا من $m = 12$. لكن بالرغم من كل هذا إلا أن التفاعلات قصيرة المدى يتم وصفها بشكل جيد بواسطة الحد الأسي المذكور في المعادلة (6.1) [13].

-ج- كمون بورن ماير:

استخدم العالمان بورن و ماير هذا الكمون في دراستهما لخصائص البلورات الأيونية، وكأي تفاعل زوجي فإن الشكل الأساسي لهذا الكمون يشبه كمون LJ المتضمن حد تنافر قصير المدى وحد تجاذب بعيد المدى، ويشار إلى هذا الكمون أحيانا باسم الأس (-6) أو $exp(-6)$، وعبارته من الشكل:

$$\phi(r) = Ae^{-\alpha r} - \frac{C}{r^6} \quad (12.1)$$

حيث:A، C، α هي ثوابت موجبة تعتمد على أنواع الذرات المتفاعلة.

يتميز هذا الكمون على كمون LJ على أن الحد الأسي الذي يصف جزء التنافر يتطابق مع المتوقع من التوزيعات الإلكترونية للذرات المتفاعلة وبالتالي فهو أكثر دقة من الحد (r^{-12}) في كمون LJ ويمثل الحد $(-r^{-6})$ جاذبية فان دير فالس.

ومثلما تم مناقشته في كمون LJ فإنه من المستحسن كتابة كمون $exp(-6)$ كما يلي:

$$\phi(r) = \frac{\epsilon}{\alpha r_m - 6}\left(6e^{-\alpha(r-r_m)} - \alpha r_m\left(\frac{r_m}{r}\right)^6\right) \quad (13.1)$$

حيث أن متغيرات المعادلة(12.1) ترتبط بـ: α و r_m من خلال العلاقات [13]:

$$A = \frac{6\,\epsilon\, e^{\alpha\, r_m}}{\alpha\, r_m - 6} \quad (14.1)$$

$$C = \frac{\alpha\, r_m^7\, \epsilon}{\alpha\, r_m - 6} \quad (15.1)$$

-د- كمون مورس:

يُستخدم كمون مورس على نطاق واسع في الكيمياء لنمذجة الحركات الاهتزازية الواقعية للجزيئات ثنائية الذرة، وكذلك عمليات كسر وتكوين الروابط فيها [14,13]، كما أنه يستخدم في بعض الأحيان لنمذجة التفاعلات بين الذرية في المعادن. عبارته من الشكل:

$$\phi(r) = \epsilon\left(e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)}\right) \quad (16.1)$$

بسبب الحد الأسي فإن التفاعل بعيد المدى فيه يخفض بسرعة أكبر بكثير من الكمونات السابقة، بالإضافة إلى أن له جدار شديد التنافر [13].

3.5.1 خوارزميات التفاضل العددي:

كما تم التطرق إليه سابقا، عادة مايتم اتباع نهج ميكانيكا الكم في دراسة الأنظمة الذرية والجزيئية على المستوى المجهري، لكن محاكاة MD عكس ذلك فهي تستخدم معالجة كلاسيكية لمثل هذه الأنظمة. فالسببان الرئيسيان اللذان يبرران المعالجة الكلاسيكية هما:

1. الطاقة اللازمة لإثارة ذرة أكبر مئات المرات من الطاقة الحركية لمركز كتلة الذرة نفسها، وبالتالي فإن التصادم بين أي ذرتين لن يغير البنية الإلكترونية للذرة.

2. الطول الموجي للذرة أقل بكثير من المسافة الفاصلة بين الذرات [1].

إذن فإن أي دراسة كلاسيكية تعتمد وبشكل أساسي على القانون الثاني لنيوتن -أحد أهم قوانين الفيزياء الكلاسيكية- ، الذي هو عبارة عن معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية -المعادلة (4.1)-.
إذا فُرضت أن حركة الذرات تتم في بعدين، فمن أجل كل ذرة تكتب معادلات الحركة [4]:

$$\frac{dv_x}{dt} = a_x \tag{17.1}$$

$$\frac{dx}{dt} = v_x \tag{18.1}$$

$$\frac{dv_y}{dt} = a_y \tag{19.1}$$

$$\frac{dy}{dt} = v_y \tag{20.1}$$

وإذا كان عدد ذرات النظام من رتبة 10^{23} فإنه من المستحيل حل 4×10^{23} معادلة تحليليا، لذلك نلجأ إلى الطرق العددية كمحاكاة MD في هذه الدراسة، والتي تعتمد بشكل أساسي على أحد هذه الخوارزميات، وبما أن المعادلتين (17.1)و (18.1) مستقلتين تماما عن المعادلتين (19.1)و (20.1)، ولتسهيل الحساب تعتبر الحركة على أنها تتم في بعد واحد.

-أ- خوارزمية أولر:

في هذه الخوارزمية يتم استبدال منحنى الدالة $x(t)$ بخط مستقيم في المجال الجزئي $[t_i, t_{i+1}]$ فيتم الحصول على:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{x(i+1) - x(i)}{\Delta t} = v_x(i) \tag{21.1}$$

نفس الأمر بالنسبة للدالة $v_x(t)$:

$$\frac{\Delta v_x}{\Delta t} = \frac{v_x(i+1) - v_x(i)}{\Delta t} = a_x(i) \tag{22.1}$$

حيث أن الميل في هذه الحالة مقدر عند بداية المجال. بعد التعديل يصبح الشكل النهائي لخوارزمية أولر كالآتي:

$$x(i+1) = x(i) + \Delta t\, v_x(i) \tag{23.1}$$

وبنفس الطريقة نجد:

$$v_x(i+1) = v_x(i) + \Delta t\, a_x(i) \tag{24.1}$$

تقدير الخطأ:
بما أن هذه الخوارزمية مجرد تقريب، فإن الخطأ فيها يتم الحصول عليه من خلال نشر تايلور للدالة $x(t)$ عند t_i كما يلي:

$$x(t) = x(t_i) + \frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=t_i}(t-t_i) + \frac{1}{2}\frac{d^2x(t)}{dt^2}\Big|_{t=t_i}(t-t_i)^2 + \cdots \tag{25.1}$$

عند أخذ $t = t_{i+1}$:

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= x(t_i) + \frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=t_i}(t_{i+1}-t_i) + \frac{1}{2}\frac{d^2x(t)}{dt}\Big|_{t=t_i}(t_{i+1}-t_i)^2 + \cdots \\ &= x(t_i) + v_x(t_i)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \tag{26.1}$$

من خلال المعادلة (26.1) فإن الخطأ في كل خطوة لهذه الخوارزمية متناسب مع $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

-ب- خوارزمية أولر كرومر:

إن معادلة السرعة في هذه الخوارزمية هي نفسها المعادلة (24.1) في خوارزمية أولر، لكن معادلة الموضع أجرى عليها كرومر تعديل بسيط، فبدل تقدير الميل عند بداية المجال الجزئي $[t_i, t_{i+1}]$ يقدر عند نهايته:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{x(i+1)-x(i)}{\Delta t} = v_x(i+1) \tag{27.1}$$

فيصبح الشكل النهائي لهذه المعادلة:

$$x(i+1) = x(i) + \Delta t\, v_x(i+1) \tag{28.1}$$

تقدير الخطأ:
لحساب الخطأ في خوارزمية أولر كرومر أولا يتم تعويض المعادلة (24.1) في المعادلة (28.1) كالآتي:

$$\begin{aligned} x(i+1) &= x(i) + \Delta t\, v_x(i+1) \\ &= x(i) + \Delta t\, v_x(i) + \Delta t^2\, a_x(i) \end{aligned} \tag{29.1}$$

بعدها يتم حساب نشر تايلور للدالة $x(t)$:

$$\begin{aligned} x(t) &= x(t_i) + \frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=t_i}(t-t_i) + \frac{1}{2!}\frac{d^2x(t)}{dt^2}\Big|_{t=t_i}(t-t_i)^2 + \cdots \\ &= x(t_i) + v_x(t_i)(t-t_i) + \frac{1}{2!}a_x(t_i)(t-t_i)^2 + \cdots \end{aligned} \tag{30.1}$$

عند أخذ $t = t_{i+1}$:

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= x(t_i) + v_x(t_i)(t_{i+1}-t_i) + \frac{1}{2!}a_x(t_i)(t_{i+1}-t_i)^2 + \cdots \\ &= x(t_i) + v_x(t_i)\Delta t + \frac{1}{2!}a_x(t_i)\Delta t^2 + \frac{1}{2!}a_x(t_i)\Delta t^2 \\ &\quad - \frac{1}{2!}a_x(t_i)\Delta t^2 + \cdots \\ &= x(t_i) + v_x(t_i)\Delta t + a_x(t_i)\Delta t^2 - \frac{1}{2!}a_x(t_i)\Delta t^2 + \cdots \\ &= x(t_i) + v_x(t_i)\Delta t + a_x(t_i)\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \tag{31.1}$$

من خلال المعادلة (31.1)فإن الخطأ في كل خطوة لهذه الخوارزمية أيضا متناسب مع $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

-ج- خوارزمية فرلات:

تحسب خوارزمية فرلات باستخدام نشر تايلور لـ: $x(t)$

$$x(t) = x(t_i) + \frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=t_i}(t-t_i) + \frac{1}{2!}\frac{d^2x(t)}{dt^2}\Big|_{t=t_i}(t-t_i)^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3x(t)}{dt^3}\Big|_{t=t_i}(t-t_i)^3 + \frac{1}{4!}\frac{d^4x(t)}{dt^4}\Big|_{t=t_i}(t-t_i)^4 + \cdots \quad (32.1)$$

عند أخذ $t = t_{i+1}$ و $t = t_{i-1}$:

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + \frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=t_i}(t_{i+1}-t_i) + \frac{1}{2!}\frac{d^2x(t)}{dt^2}\Big|_{t=t_i}(t_{i+1}-t_i)^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3x(t)}{dt^3}\Big|_{t=t_i}(t_{i+1}-t_i)^3 + \frac{1}{4!}\frac{d^4x(t)}{dt^4}\Big|_{t=t_i}(t_{i+1}-t_i)^4 + \cdots \quad (33.1)$$

$$x(t_{i-1}) = x(t_i) + \frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=t_i}(t_{i-1}-t_i) + \frac{1}{2!}\frac{d^2x(t)}{dt^2}\Big|_{t=t_i}(t_{i-1}-t_i)^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3x(t)}{dt^3}\Big|_{t=t_i}(t_{i-1}-t_i)^3 + \frac{1}{4!}\frac{d^4x(t)}{dt^4}\Big|_{t=t_i}(t_{i-1}-t_i)^4 + \cdots \quad (34.1)$$

بجمع المعادلتين (33.1) و (34.1) طرفا لطرف ينتج:

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= 2x(t_i) - x(t_{i-1}) + \frac{d^2x(t)}{dt^2}\Big|_{t=t_i}(t_{i-1}-t_i)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\ &= 2x(t_i) - x(t_{i-1}) + a_x(t_i)\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \end{aligned} \quad (35.1)$$

إذن الخطأ في كل خطوة لخوارزمية فرلات من رتبة Δt^4.

-د- خوارزمية رونج كوتا من الرتبة الثانية:

في خوارزمية رونج كوتا 2 $(RK2)$ يتم اتباع نفس طريقة خوارزمية أولر ، فقط الاختلاف يكون في تقدير الميل في المجال الجزئي $[t_i, t_{i+1}]$ ، ففي هذه الخوارزمية يقدر الميل عند منتصف المجال:

$$\frac{dx}{dt} = f(t_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}) \quad (36.1)$$

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{x(i+1)-x(i)}{\Delta t} = f(t_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}) \quad (37.1)$$

بعد التعديل تصبح الخوارزمية من الشكل:

$$\begin{aligned} x(i+1) &= x(i) + \Delta t f(t_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}) \\ &= x(i) + K_2 \end{aligned} \quad (38.1)$$

لحساب الثابت K_2 يجب حساب $x_{i+\frac{1}{2}}$ والتي يقدر فيها الميل عند بداية المجال:

$$\frac{x(i+\frac{1}{2})-x(i)}{\Delta t/2} = f(t_i, x_i) \quad (39.1)$$

بعد التعديل ينتج:

$$\begin{aligned} x(i+\frac{1}{2}) &= x(i) + \frac{\Delta t}{2} f(t_i, x_i) \\ &= x(i) + \frac{K_1}{2} \end{aligned} \tag{40.1}$$

بعد ترتيب العلاقات المتوصل إليها:

$$\begin{aligned} K_1 &= \Delta t f(t_i, x_i) \\ K_2 &= \Delta t f(t_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}) \\ x(i+1) &= x(i) + K_2 \end{aligned} \tag{41.1}$$

تقدير الخطأ:

يتم حساب نشر تايلور للدالة $x(t)$ لتقدير رتبة الخطأ في خوارزمية $RK2$:

$$x(t) = x(t_i) + \frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=t_i}(t-t_i) + \frac{1}{2}\frac{d^2x(t)}{dt^2}\Big|_{t=t_i}(t-t_i)^2 + \cdots \tag{42.1}$$

عند أخذ $t = t_{i+1}$:

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= x(t_i) + \frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=t_i}(t_{i+1}-t_i) + \frac{1}{2}\frac{d^2x(t)}{dt^2}\Big|_{t=t_i}(t_{i+1}-t_i)^2 + \cdots \\ &= x(t_i) + f(t_i, x_i)\Delta t + \frac{1}{2}f'(t_i, x_i)\Delta t^2 + \cdots \end{aligned} \tag{43.1}$$

$$\begin{aligned} \frac{df(t_i, x_i)}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x}\frac{dx}{dt} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + f(t_i, x_i)\frac{\partial f}{\partial x} \end{aligned} \tag{44.1}$$

الآن بتعويض المعادلة (44.1) في المعادلة (43.1) ينتج:

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= x(t_i) + \Delta t\left(f(t_i, x_i) + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2}f(t_i, x_i)\frac{\partial f}{\partial x}\right) + \cdots \\ &= x(t_i) + \Delta t \;\; f\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}, x_i + \frac{\Delta t}{2}f(t_i, x_i)\right) + \cdots \\ &= x(t_i) + \Delta t \;\; f\left(t_{i+\frac{1}{2}}, x_i + \frac{K_1}{2}\right) + \cdots \\ &= x(t_i) + K_2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \end{aligned} \tag{45.1}$$

إذن الخطأ في كل خطوة لخوارزمية $RK2$ هو من رتبة Δt^3.

إن طريقة MD تهتم بحساب الحركة على عدد كبير جدا من الخطوات الزمنية، ومن الواضح أن الأخطاء العددية المرتبطة بكل خوارزمية من الخوارزميات السابقة تتراكم بزيادة عدد الخطوات الزمنية، لذلك سيتم اختيار الخوارزمية بناء على أقل رتبة خطأ للحصول على دقة أكبر في النتائج العددية. فمن خلال المقارنة بين مختلف الخوارزميات المحسوبة سابقا لوحظ أن أكبر خطأ موجود في خوارزمتي أولر وأولر كرومر لأنهما متكافئتين من حيث دقة الحساب، الاختلاف بينهما يكمن في التغيير البسيط الذي قام به كرومر على خوارزمية اولر لحل مشكلة انحفاظ الطاقة فيها. في حين أن الأخطاء العددية المرتبطة بخوارزمية فرلات هي أصغر بكثير من الخوارزميات الثلاثة الأخرى، وكمثال على ذلك أنها تحافظ على الطاقة بشكل جيد مع سرعة الحساب فيها. ولهذه الأسباب فإن خوارزمية فرلات هي الاختيار المناسب لمحاكاة MD [4].

الفصل الثاني

الانتقالات الطورية

الفصل 2

الانتقالات الطورية

1.2 تمهيد:

الانتقالات الطورية من أهم الظواهر التي تحدث في معظم و إن لم تكن في كل مجالات الفيزياء، فهي تحتوي على كم هائل من المعلومات التي نريد معرفتها حول الأنظمة الفيزيائية التي ندرسها [15]. على الرغم من صعوبة وتعقيد هذا المجال إلا أنه مهم جدا لفهم الانتقالات التي تواجهنا في الحياة اليومية ولدراسة الأنظمة الإحصائية [5].

لذلك خصص هذا الفصل للتعرف على الانتقالات الطورية وتصنيفاتها وأنواعها، بالإضافة إلى بعض المفاهيم الأساسية المرافقة لهذه الظاهرة.

2.2 الانتقال الطوري:

1.2.2 مفهوم الطور:

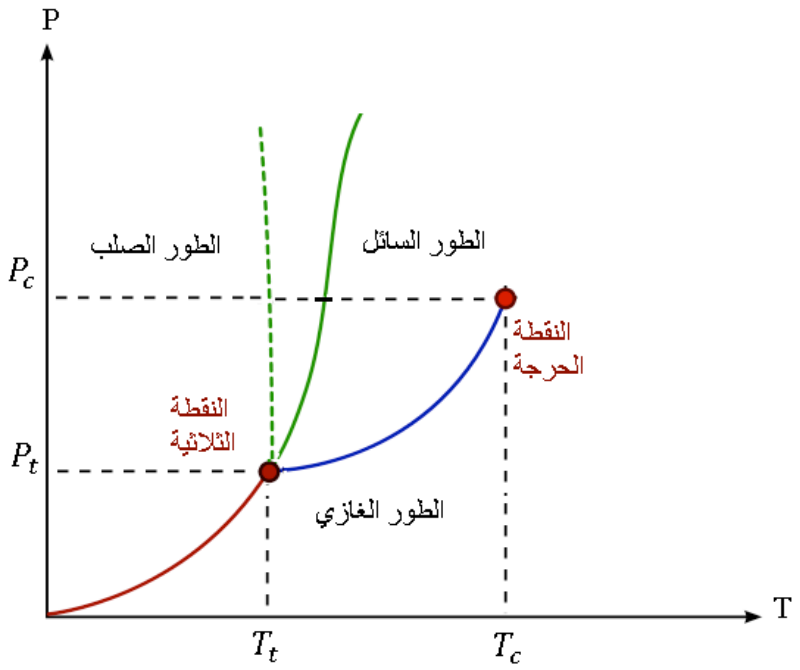
الطور هو حالة للمادة متوازنة ترموديناميكيا لها تركيبة معينة، تختلف عن الحالات المتوازنة الأخرى للمادة نفسها من حيث الخصائص الفيزيائية والكيميائية، وأبسط مثال على ذلك حالات المادة (الصلبة، السائلة والغازية) [17,16].

2.2.2 مفهوم الانتقال الطوري:

الانتقال أو التحول الطوري ظاهرة تعمل على تحويل المادة من طور لآخر، ما يميز هذا التحول هو التغيير النوعي و الكمي المفاجئ لخصائص المادة، و هو ناتج عن اختلاف متغيرات تحكم النظام مثل : درجة الحرارة (T)، الضغط (P)، الحقل المغناطيسي (B) ...الخ. وأشهر هذه الانتقالات هي تحولات المادة بين حالاتها الأربعة الصلبة، السائلة، الغازية والبلازما. هناك أيضا تحولات طورية مازالت مجهولة لحد الآن وأخرى هي المسؤولة عن الظواهر غير الإضطرابية التي تميز التفاعلات المعيارية التي تتحكم في كل القوى الطبيعية [15,5].

3.2.2 مخطط الطور:

مخطط الطور عبارة عن منحنى للضغط (P) ودرجة الحرارة (T) يتضمن حالات المادة الثلاث الصلبة، السائلة والغازية، وكمثال للتوضيح والشرح أكثر يتم أخذ المخطط الطوري للماء [16] الممثل بالشكل (1.2) .



شكل 1.2: المخطط الطوري للماء $P-T$ [15].

إن الانتقال من طور لآخر في هذا المخطط يتم بعبور محور درجة الحرارة الذي تميزه الفاصلتين T_c و T_t ، كذلك عبور محور الضغوط الذي تميزه الترتيبتين P_c و P_t [4]. تتعايش الأطوار فيما بينها بواسطة المنحنيات الثلاثة الممثلة بالألوان:

- الأحمر: يفصل الطور الصلب عن الغازي والمعروف بمنحنى التسامي أو الترسيب.
- الأخضر: يفصل الطور الصلب عن السائل والمعروف بمنحنى التجمد أو الانصهار.
- الأزرق: يفصل الطور السائل عن الغازي والمعروف بمنحنى التبخر أو التكثيف [5].

وكما هو ملاحظ فإن هذا المخطط يحتوي على نقطتين مميزتين هما:

-أ- النقطة الثلاثية:

إن نقطة التقاء منحنيات التعايش للأطوار الثلاث تدعى بالنقطة الثلاثية t، عند هذه النقطة جميع الأطوار الصلبة، السائلة والغازية تكون في حالة توازن عند درجة حرارة وضغط محددين $(P_t = 611\,pa\,;\,T_t = 273.16\,K)$ [16]. عند التسخين عند ضغط يفوق ضغط النقطة الثلاثية $(P > P_t)$ يتحول الصلب إلى سائل، لكن عند التسخين عند ضغط أقل من ضغط النقطة الثلاثية $(P < P_t)$ يتحول الصلب إلى غاز [17].أيضا ليس بالضرورة أن تتغير درجة الحرارة للانتقال من طور لآخر، فبثبوت درجة الحرارة وتغيير الضغط يمكن أن يحدث ذلك.

-ب- النقطة الحرجة:

ينتهي الفرع الأزرق من المخطط الطوري للماء بنقطة يطلق عليها اسم النقطة الحرجة C، حيث يمكن الانتقال باستمرار بين الطور السائل والغازي بعد هذه النقطة على عكس الانتقال قبلها الذي يكون غير مستمر، أي أن التمييز بين السائل والغاز يصبح مستحيلا. في كل نقطة من الفرع الأزرق تختلف كثافة السائل عن كثافة الغاز $(\rho_l \neq \rho_g)$ باستثناء النقطة الحرجة والتي يكون فيها: $\rho_l = \rho_g$ [16,5].

3.2 دالة الانثالبي لجيبس:

توصف الانتقالات الطورية في المخطط الطوري $P-T$ بواسطة دالة الانثالبي لجيبس $G(P,T)$ المعرفة بالمعادلة(1.2) التي هي دالة للضغط P ودرجة الحرارة T. نحصل على الأنتروبي S والحجم V بواسطة المشتقات الأولى لـ $G(P,T)$ مرة عند ضغط ثابت ومرة عند درجة حرارة ثابتة [18]:

$$dG = -S\,dT + V\,dP \tag{1.2}$$

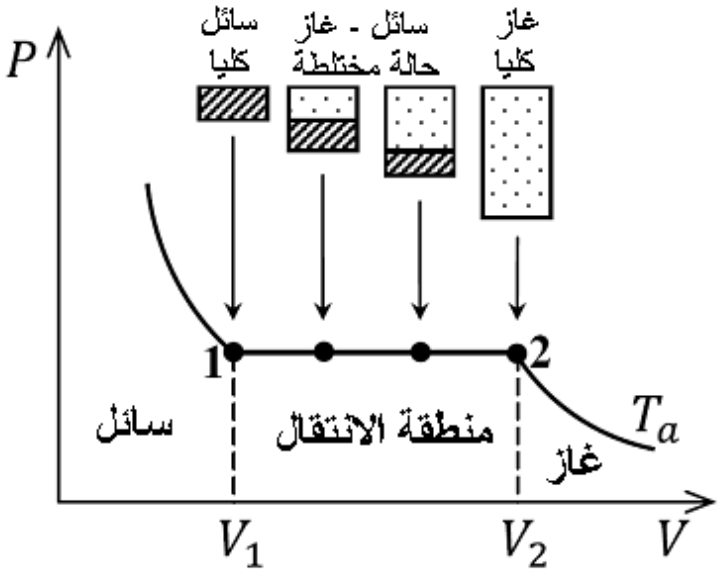
$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P \tag{2.2}$$

$$V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T \tag{3.2}$$

1.3.2 الحرارة الكامنة:

لإظهار معنى الحرارة الكامنة يعتمد المنحنى $P-V$ الممثل بالشكل (2.2) والذي هو اسقاط لمعادلة الحالة للماء بدلا من المخطط الطوري الممثل في الشكل(1.2). يلاحظ وجود طورين 1 و 2 يتعايشان عند نفس درجة الحرارة T_0 لكنهما يختلفان في الانتروبي S_1 و S_2. لذلك عند الانتقال من طور لآخر يجب على النظام أن يمتص أو يحرر حرارة يطلق عليها بالحرارة الكامنة التي تعطى بـ [18]:

$$\Delta Q_L = T_0(S_2 - S_1) \tag{4.2}$$



شكل 2.2: المخطط الطوري للماء $P-V$ [18].

4.2 تصنيف الانتقالات الطورية:

للانتقالات الطورية تصنيفات عدة تؤدي في أغلب الحالات إلى نفس الدرجة، والتي لا تخلو من بعض الاختلاف بين تصنيف وآخر [5]، وأهم هذه التصنيفات وأكثرها تداولا:

1.4.2 تصنيف اهرنفست:

في عام 1933 اقترح اهرنفست أن الانتقال من الدرجة الأولى هو الانتقال المصحوب بانقطاعات في الكميات الفيزيائية المرتبطة بالمشتقات الأولى للدوال الترموديناميكية التي تصف النظام، على سبيل المثال دالة الأنثالبي لجيبس G، فإذا كان المشتق المعني هو الأنتروبي S يظهر انقطاعا، فإن الانتقال من الدرجة الأولى يتضمن حرارة كامنة ΔQ_L. وبالنسبة للانتقال من الدرجة الثانية فإن عدم الاستمرارية تكون في الكميات الفيزيائية المرتبطة بالمشتقات الثانية لـ G في حين أن المشتقات الأولى تكون مستمرة. بالإضافة إلى أن هذا الانتقال يكون غير مرفوق بحرارة كامنة ΔQ_L [20,19,5].

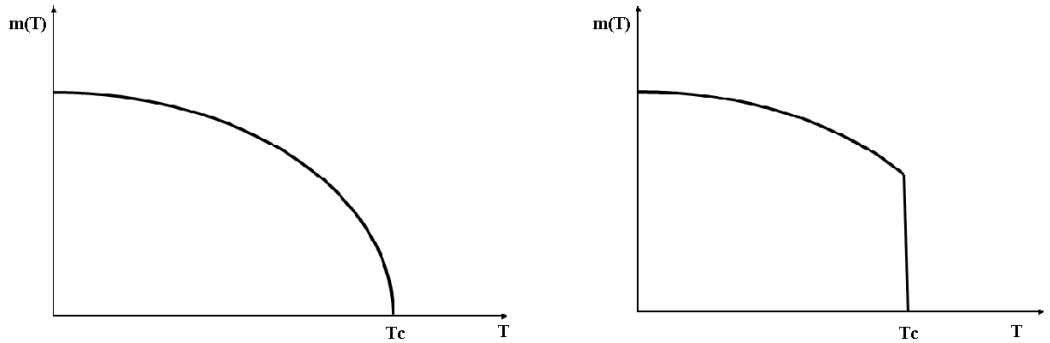
بشكل أعم إذا كان المشتق من الرتبة $n-1$ لـ G مستمر والمشتق من الرتبة n غير مستمر فإن الانتقال يكون من الدرجة n [19].

2.4.2 تصنيف لاندو:

اقترح لاندو في عام 1937 فكرة مثمرة لتصنيف التحولات الطورية، حيث أشار إلى أن الانتقال الطوري غير المصحوب بحرارة كامنة يصاحبه تغيير في تناظر النظام، ومنه ربط لاندو هذا الأخير بفكرة متغير آخر دفعه إلى تقديم مفهومه ألا وهو وسيط الترتيب(سيعرف لاحقا)، حيث أن هذه الكمية تساوي صفرا في الطور الأكثر تناظرا (أي عند درجات حرارة عالية) وتخالف الصفر عكس ذلك.

أتاحت فكرة وسيط الترتيب وجود تصنيفان للانتقالات الطورية وهي كما يلي:

1. **انتقالات بدون وسيط ترتيب:** هي انتقالات من الدرجة الأولى ،بمعنى اهرنفست وسيط الترتيب فيها يكون متقطع.
2. **انتقالات مع أو بوسيط ترتيب:** تتوافق الانتقالات من الدرجة الثانية مع استمرارية في وسيط الترتيب و عدم استمرارية في مشتقات الدوال الترموديناميكية [19,5].



-أ- انتقال طوري من الدرجة الأولى. -ب- انتقال طوري من الدرجة الثانية.

شكل 3.2: الاختلافات التخطيطية بين وسيطي الترتيب كدالة لدرجة الحرارة [19].

وسيط الترتيب:

وسيط الترتيب دالة ترموديناميكية يستخدم في التمييز بين أطوار الأنظمة المختلفة [21]، كما يسمح بتحديد درجة الانتقال الطوري. إذا وجد كسر تناظر في النظام هذا يعني أن وسيط الترتيب يكون مختلفا عن الصفر، أما إذا كان معدوما فإن النظام يكون مضطربا (أي عند درجة حرارة عالية). على العموم لاتوجد طريقة معينة لتحديد وسيط الترتيب، بل قد يكون تحديده مستحيلا في بعض الانظمة. كما أنه يأخذ أشكالا مختلفة حيث يمكن أن يكون عددا سلميا أو شعاعيا أو كائنا رياضيا معقدا. ولتوضيح معناه أكثر فيما يلي بعض الأمثلة:

- بالنسبة لعملية التبخر أو الانتقال سائل-غاز فإن وسيط الترتيب هو عبارة عن الفرق بين كثافة السائل وكثافة الغاز $(\rho_l - \rho_g)$ ، على وجه الخصوص وسيط الترتيب في هذا المثال لايتعلق بتغير تناظر النظام عند الانتقال من طور لآخر، فعند $T > T_c$ يكون وسيط الترتيب معدوما ولا يمكن التمييز بين الطورين، والعكس عند $T < T_c$ فإن وسيط الترتيب يكون موجبا ،إذن فهو يعرف بعدد سلمي بعده $n = 1$.

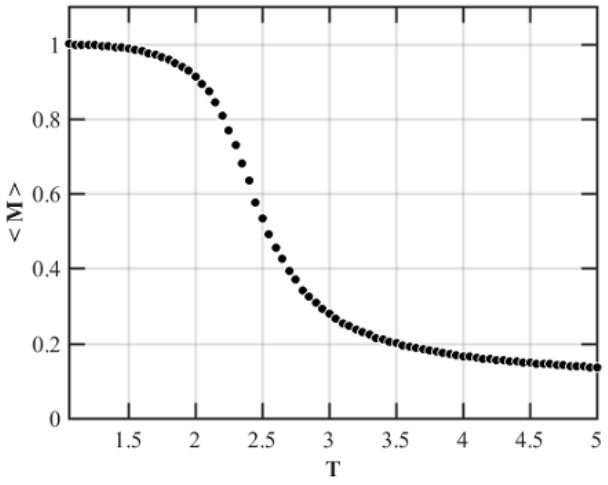
وكتعميم لهذا المثال يمكن القول بأن وسيط الترتيب للانتقالات الطورية من الدرجة الأولى هو كثافة المادة ρ.

- بالنسبة للانتقال الفيرومغناطيسي-بارامغناطيسي فإن وسيط الترتيب هو المغنطة M، تكون $M = 0$ عند $T > T_c$ و $M \neq 0$ عند $T < T_c$، وسيط الترتيب لهذا الانتقال هو شعاع بعده $n = 3$ [5].

كسر التناظر التلقائي:

بتغير درجة الحرارة يتغير تناظر النظام، وفي الطبيعة العديد من الأمثلة حول ذلك من أبسطها:

- في حالة تجمد الماء، الطور السائل له تناظر مكاني لايحتويه الطور الصلب.
- فوق درجة حرارة كوري يتم ترتيب العزوم المغناطيسية لذرات المواد الفيرومغناطيسية بشكل عشوائي، بينما تحت درجة حرارة كوري يظهر اتجاه معين للعزوم يعطى بواسطة شعاع المغنطة التلقائي [5]. والمنحنى الممثل في الشكل (4.2) يلخص ماتم ذكره في هذا المثال.



شكل 4.2: السلوك النوعي للمغنطة [6].

كسر التناظر التلقائي أو العفوي هو التغيير في تناظر النظام عند النقطة الحرجة بالنسبة للانتقال الطوري المستمر، يلاحظ عندما يكون تناظر الكمون الذي يصف النظام يختلف عن تناظر حالة النظام [5].

5.2 أنواع الانتقالات الطورية:

كلاسيكيا تقسم الانتقالات الطورية في الطبيعة إلى ثلاثة أقسام [15]:

1.5.2 انتقال طوري من الدرجة الأولى:

هو انتقال من طور لآخر بوسيط ترتيب غير مستمر، يكون مرفقا بحرارة كامنة تحت تأثير خارجي [15]، وكمثال على الانتقالات الطورية من الدرجة الأولى سيقتصر على الانتقال من الطور الصلب إلى الطور السائل (ظاهرة الانصهار).

2.5.2 انتقال طوري من الدرجة الثانية:

كما يسمى أيضا الانتقال الطوري المستمر أو الحرج، يحدث تحت تأثير القوى الداخلية للنظام مع عدم وجود حرارة كامنة مرفقة بتقلبات حرجة وانكسار تلقائي للتناظر [15]. يعتبر الانتقال فيرومغناطيسي- بارامغناطيسي المثال الأكثر شيوعا لهذا النوع من الانتقالات [7].

الانتقال فيرومغناطيسي-بارامغناطيسي:

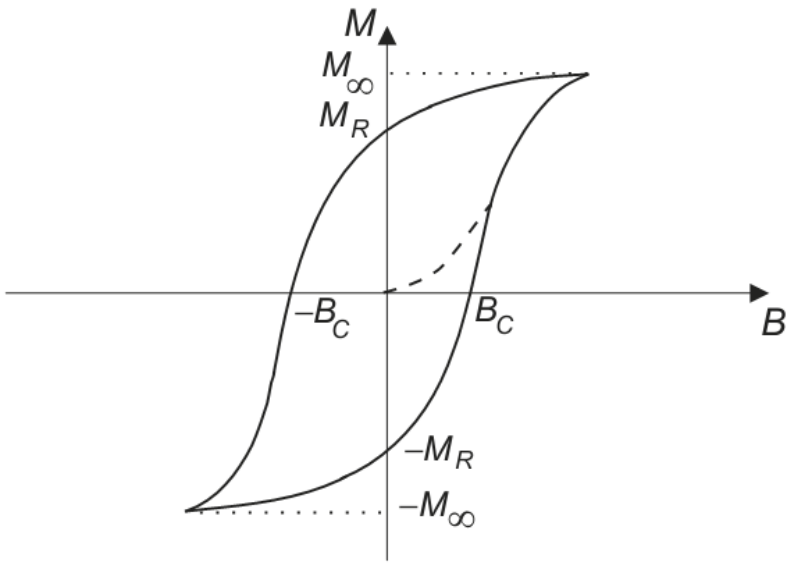
الفيرومغناطيسية ظاهرة معقدة للغاية لذلك سيتم التعامل معها بصفة سطحية، فعند درجة حرارة الغرفة تتغنط بعض المواد (الحديد، الكوبالت، النيكل... وما إلى ذلك) وتبقى مغنطتها دائمة في حالة عدم تأثرها بأي مجال مغناطيسي خارجي، ترتبط هذه المغنطة بالسلوك الجماعي لعزوم الذرات، هذا يعني من الناحية الميكروسكوبية أن هناك عدد هام من الكترونات طبقة داخلية غير مكتملة لها سبينات تدور بشكل فعال في نفس الاتجاه. فتجريبيا إذا تم تسخين مادة فيرومغناطيسية عند $T > T_c$ تختفي مغنطتها وتصبح المادة بارامغناطيسية، يرجع هذا إلى أن التفاعل بين السبينات يعطيها اتجاها واحدا بينما في حالة الإثارة الحرارية عند $T > T_c$ فإن هذه السبينات تأخذ اتجاهات عشوائية مما يؤدي إلى اختفاء مغنطة المادة [7,5].

توجد ظاهرة تبديها المواد البارامغناطيسية تسمى بظاهرة التلاكؤ، ولشرحها قدم وايس في عام 1910 فرضية مفادها أن المواد الفيرومغناطيسية تمتلك مغنطة تلقائية تتكون من مجالات صغيرة على المستوى العياني وكبيرة على المستوى المجهري. وقد تم التأكد من صحة هذه الفرضية تجريبيا بواسطة وسائل مراقبة، فعند $T < T_c$ إذا تعرضت مادة فيرومغناطيسية إلى مجال مغناطيسي خارجي فإن مغنطة مجالات وايس تصل إلى قيمة التشبع، أي أن جميع العزوم المغناطيسية الجزئية للمجال يكون لها نفس الاتجاه. لكن المغنطة بعيدة كل البعد عن الوصول إلى قيمة التشبع على المستوى العياني، لأنه في الحقيقة العزوم المغناطيسية لمجالات وايس ليست لها نفس الاتجاه. ومن خلال تطبيق حقل مغناطيسي شديد وبصفة متزايدة تزداد المغنطة العيانية شيئا فشيئا والتي لها أصلان:

- بالنسبة للحقول المغناطيسية ضعيفة الشدة يكون عدد مجالات وايس التي تتبع اتجاه الحقل المغناطيسي أكثر من تلك التي تتبع الاتجاهات الأقل تفضيلا.
- أما بالنسبة للحقول المغناطيسية عالية الشدة يكون هناك دوران لمجالات وايس التي تأخذ بعد ذلك الاتجاه الأكثر تفضيلا في الطاقة.

يمكن تلخيص ظاهرة التلاكؤ في الشكل (5.2). فالبداية تكون من مادة فيرومغناطيسية ذات مغنطة معدومة $M = 0$، تزداد عند تطبيق مجال مغناطيسي خارجي B ثابت الاتجاه (الخط المتقطع) إلى أن تصل إلى قيمة حدية M_∞ تسمى مغنطة التشبع، بعدها تنخفض قيمة M بانخفاض قيمة B إلى أن تصل إلى قيمة M_R تدعى بالمغنطة المتبقية عند $B = 0$ ، إذا تم الاستمرار في تخفيض قيمة B تنعدم المغنطة عند $B = -B_c$ الذي يسمى بالمجال القسري المعاكس. إذا خفض B أكثر تصل المغنطة إلى $-M_\infty$ تسمى أيضا مغنطة التشبع، الآن لو زادت قيمة الحقل إلى أن تنعدم تصل المغنطة إلى $-M_R$

وتختفي عند $B = 0$ ولو زادت قيمة الحقل أكثر نرجع إلى قيمة مغنطة التشبع M_∞. من خلال تأرجح الحقل المغناطيسي تشكل المغنطة دورة تدعى بدورة التلاكؤ [5].



شكل 5.2: دورة التلاكؤ [5].

3.5.2 انتقال طوري لانهائي الدرجة:

هو انتقال طوري من أغرب مايكون، مستمر لكنه لا يكسر تناظر أي نظام. من أهم الأمثلة فيه الانتقالات الطورية الكمومية-وهو موضوع آخر طويل- [15].

6.2 الانصهار:

الانصهار هو تحول المادة من الحالة الصلبة إلى الحالة السائلة [22]. ففي عام 1910 اقترح ليندمان أول نموذج لظاهرة الانصهار، أراد من خلاله إيجاد معيار فيزيائي بسيط لتحديد حالة انصهار مادة صلبة وفقدان استقرارها. يعتمد هذا النموذج على الملاحظة التجريبية فعندما ترتفع درجة حرارة مادة صلبة (اكتساب حرارة كامنة من الوسط الخارجي) تزداد سعة اهتزاز الذرات حول موضع توازنها، حيث افترض ليندمان أنه عندما تصل إزاحة الذرات إلى مقدار معين من المسافة الفاصلة بينها في الشبكة، فإن المادة الصلبة تذوب (تحدث ظاهرة الانصهار) [23].

1.6.2 نقطة الانصهار:

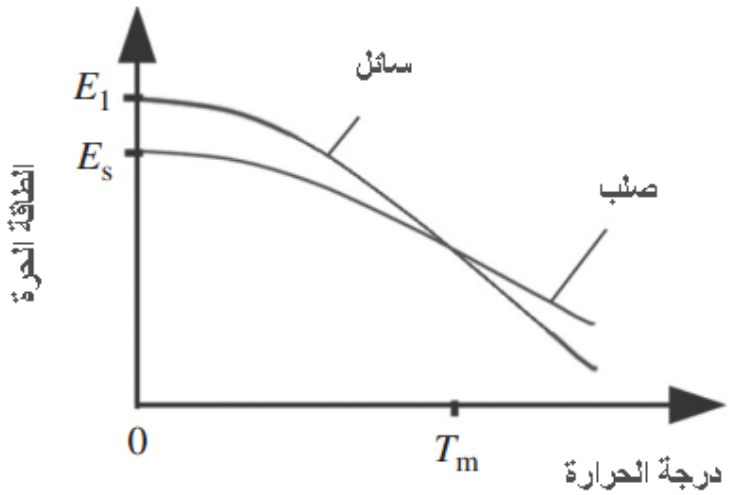
نقطة الانصهار العادية للمادة الصلبة هي درجة الحرارة التي يكون عندها السائل والصلب في حالة اتزان تحت ضغط جوي $1\ atm$. فعلى سبيل المثال نقطة الانصهار الطبيعية للجليد هي $0.0\ C°$ ، وبالتالي يتعايش الماء السائل والجليد إلى أجل غير مسمى (في حالة توازن) عند درجة الحرارة هذه تحت ضغط $1\ atm$. إذا تم تقليل درجة الحرارة حتى ولو بمقدار ضئيل، فإن كل الماء يتجمد، وعلى العكس إذا ارتفعت درجة الحرارة بشكل غير محدود، يذوب كل الجليد.

المواد التي تتغير هويتها أو طبيعتها الكيميائية قبل أن تتغير حالتها الفيزيائية لا تملك نقاط انصهار طبيعية [22].

2.6.2 درجة حرارة الانصهار:

عادة ما تكون درجة الحرارة أكثر الوسائل التي يمكن الوصول إليها للتحكم في حالة التوازن. فمن الملاحظ أن الشكل (6.2) يوضح منحنيين منفصلين للطاقة الحرة $F_s(T)$ و $F_l(T)$ للطورين السائل والصلب لعنصر نقي، حيث يقع المنحنى $F_s(T)$ للمادة الصلبة تحت منحنى المادة السائلة $F_l(T)$ عند $T = 0$ لأن الطاقة الداخلية للمادة الصلبة تكون أصغر من الطاقة الداخلية للمادة السائلة $E_s < E_l$. فعند التوازن الحراري، وفي درجات الحرارة المنخفضة تتبع المادة منحنى الطور الصلب للشكل (6.2)، بعدها تنتقل إلى منحنى الطور السائل عند $T > T_m$ ، وعند $T = T_m$ يحدث انتقال للطور من الدرجة الأولى تتغير فيه المادة من الحالة الصلبة إلى الحالة السائلة كليا في مجال متناهي في الصغر لدرجات الحرارة بجانب T_m، هذا مايدل على أن المشتق الأول للطاقة الحرة $\frac{dF}{dT}$ يكون غير مستمر عند T_m، حيث تعرف الطاقة الحرة بالعبارة:

$$F(T) \;=\; E - TS \tag{5.2}$$



شكل 6.2: منحنى الطاقة الحرة لعنصر نقي [24].

إن المعيار المعتمد لتحديد درجة حرارة انصهار عنصر ما هو تساوى الطاقات الحرة للطورين السائل والصلب عندها:

$$F_s(T_m) \;=\; F_l(T_m) \tag{6.2}$$

$$E_s \;-\; T_m S_s \;=\; E_l \;-\; T_m S_l \tag{7.2}$$

$$S_l \;-\; S_s \;=\; \frac{E_l \;-\; E_s}{T_m} \;=\; \frac{\Delta Q_L}{T_m} \tag{8.2}$$

حيث أن الحرارة الكامنة ΔQ_L عند T_m تعرف بالعبارة:

$$\Delta Q_L \;=\; [S_l(T_m) \;-\; S_s(T_m)]\; T_m \tag{9.2}$$

إن تحرير أو امتصاص الحرارة الكامنة عند T_m له تأثير كبير على كيفية تسخين أو تبريد المادة. فبدون حرارة كامنة لا يوجد سوى تغيير أحادي في درجة الحرارة مع مرور الوقت، لكن بوجودها يحدث التوقف أو التباطؤ في التسخين أو التبريد عند T_m [24].

7.2 الأسس الحرجة:

تصف الأسس الحرجة سلوك كميات مادية معينة قابلة للقياس في جوار النقطة الحرجة، على سبيل المثال الحرارة النوعية أو الحساسية المغناطيسية ... في حالة الأنظمة الفيرومغناطيسية. بداية يمكن تعريف الأسس الحرجة بشكل عام ودقيق لوصف السلوك بالقرب من النقطة الحرجة للدالة $f(t)$ حيث:

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1 \tag{10.2}$$

وبافتراض أن $f(t)$ موجبة ومستمرة لقيم t موجبة وصغيرة بما فيه الكفاية، يعرف الأساس الحرج λ المرتبط بالدالة $f(t)$ كما يلي:

$$\lambda \equiv \lim_{t \to 0} \frac{ln\,|f(t)|}{ln\,|t|} \tag{11.2}$$

وكاختصار لما سبق تكتب الدالة $f(t)$ من الشكل [25,5]:

$$f(t) \sim |t|^{\lambda} \tag{12.2}$$

تدل العلاقة الأخيرة أن الدالة $f(t)$ تتغير بتغير $|t|^{\lambda}$ عند $t \to 0$. وللتوضيح أكثر فيما يلي الأسس الحرجة الأساسية للانتقال فيرومغناطيسي-بارامغناطيسي [5]

جدول 1.2: الأسس الحرجة الأساسية للانتقال فيرومغناطيسي-بارامغناطيسي [5].

السعة الحرارية $(B = 0)$	$C \sim \|t\|^{-\alpha}$
المغنطة $(B = 0)$	$M \sim (-t)^{\beta *}$
الحساسية عند درجة حرارة ثابتة $(B = 0)$	$\chi_T \sim \|t\|^{-\gamma}$
ثبوت درجة الحرارة الحرجة $t = 0\,,\ B \to 0$	$B \sim \|M\|^{\delta}$
طول الارتباط	$\xi \sim \|t\|^{-\nu}$
دالة الربط لجسمين عند $t = 0$	$G(r) \sim 1/r^{d-2+\eta}$

أيضا بالنسبة للانتقال سائل-غاز والذي يعتبر كنموذج للانتقال الطوري من الدرجة الأولى تعطى الأسس الحرجة له كما يوضحه الجدول (2.2):

جدول 2.2: الأسس الحرجة الأساسية للانتقال سائل-غاز [5].

السعة الحرارية عند حجم ثابت	$C_V \sim \|t\|^{-\alpha}$
الفرق بين كثافتي السائل والغاز	$(\rho_l - \rho_g) \sim (-t)^{\beta^*}$
الانضغاطية عند ثبوت درجة الحرارة	$\chi_T \sim \|t\|^{-\gamma}$
ثبوت درجة الحرارة الحرجة $(t = 0)$	$P - P_c \sim \|\rho_l - \rho_g\|^{\delta}\ sgn(\rho_l - \rho_g)$
طول الارتباط	$\xi \sim \|t\|^{-\nu}$
دالة الربط لجسمين عند $t = 0$	$G(r) \sim 1/r^{d-2+\eta}$

8.2 العالمية:

لا تعتمد الأسس الحرجة على تفاصيل التفاعلات داخل الأنظمة بل إنها تتعلق بالخصائص العامة لها فقط، فبالنسبة للتفاعلات قصيرة المدى كالسوائل أو المواد الفيرومغناطيسية تعتمد أسسها الحرجة على بعد فضاء النظام d وبعد وسيط الترتيب n فقط اللذان يعتبران من أهم الكميات الواصفة لنظام ما في جوار النقطة الحرجة، كذلك تستعمل في اختبار صحة النماذج، وبما أنها تتيح الفرصة لتعريف فئات تشمل انتقالات طورية تبدو في البداية مختلفة تماما فإنها تخضع لقوانين عالمية.

خلاصة القول أن بعد الفضاء d وبعد وسيط الترتيب n يحددان سلوك النظام في جوار النقطة الحرجة، ويمثلان كزوج (d,n) فئة عالمية. إن الأنظمة المنتمية إلى نفس الفئة متماثلة في السلوك والأسس الحرجة، مثلا بالنسبة لـ $d=3$ و $n=1$ تدل على الانتقال سائل-غاز والانتقال الفيرومغناطيسي أحادي المحور (نموذج ايزينغ ثلاثي الأبعاد). من خلال التجربة تم التوصل إلى أن قانون العالمية محقق في جوار النقطة الحرجة.

لكل نظام معين مجموعة أسس حرجة، فلو اعتبر الانتقال سائل-غاز لمائع، فإن السعة الحرارية C_V، الفرق بين كثافتي الطورين $\rho_l-\rho_g$ والانضغاطية عند درجة حرارة ثابتة K_T تتغير في جوار النقطة الحرجة بالترتيب على النحو $|t|^{-\alpha}$، $(-t)^{\beta^*}$، $|t|^{-\gamma}$. من خلال تقنية مجموعة إعادة التنظيم يمكن إثبات أن الأسس الثلاثة السابقة ترتبط من خلال العلاقة:

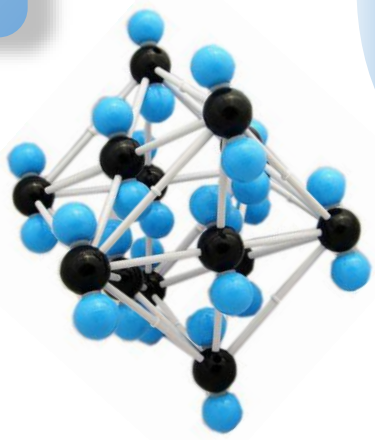
$$\alpha + 2\beta^* + \gamma = 2 \tag{13.2}$$

والتي تسمى بقانون السلم أو المقياس. يؤدي الترموديناميك الكلاسيكي إلى المتراجحة:

$$\alpha + 2\beta^* + \gamma \leqslant 2 \tag{14.2}$$

التي هي في الحقيقة مساواة [5].

الفصل الثالث



الانصهار والديناميك الجزيئي

الفصل 3

الانصهار والديناميك الجزيئي

1.3 تمهيد:

سنحاول في هذا الفصل فهم تصرف غاز كلاسيكي (الأرغون) وكيفية اقترابه من حالة التوازن الحراري باستخدام تقنية محاكاة الديناميك الجزيئي، بالإضافة إلى التحقق من ظاهرة الانصهار باستعمال نفس التقنية. وسنصف طريقة إنشاء برنامج المحاكاة المعتمد في هذه المذكرة بلغة الفورتران ، مع عرض شامل لمختلف النتائج والمنحنيات المتحصل عليها مع تحليلها ومناقشتها.

2.3 كمون ليونارد جونس:

كما ذكرنا سابقا في الفصل الأول فإن كل ذرة تتأثر بقوى جميع الذرات الأخرى التي تؤدي إلى تصادم الذرات فيما بينها، ولتقدير القوة بين ذرتين يتطلب معرفة كمون التفاعل بينهما، حيث أن حساب هذا الأخير يعتمد على نوع الذرات وطبيعة القوى بينها [4].

في هذا العمل أخذنا صندوق به N ذرة أرغون ، وللتبسيط اعتبرنا حركة الذرات في بعدين $2d$ ، ومنه فإن معادلات الحركة للذرة i التي تتموضع عند (x_i, y_i) بالسرعة $(v_{x,i}, v_{y,i})$ تكتب من الشكل [1]:

$$\frac{dv_{x,i}}{dt} = a_{x,i} \ , \ \frac{dx_i}{dt} = v_{x,i} \tag{1.3}$$

$$\frac{dv_{y,i}}{dt} = a_{y,i} \ , \ \frac{dy_i}{dt} = v_{x,i} \tag{2.3}$$

بافتراض أن كمون التفاعل بين أي زوج من ذرات الأرغون يتعلق بالمسافة الفاصلة (r_{ki}) بين الذرتين i وk فإن الكمون الكلي يعطى بـ [1]:

$$U = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{k=i+1}^{N} u(r_{ki}) \tag{3.3}$$

يمكن حساب u من ميكانيك الكم لكن هذا الحساب معقد جدا، ولذلك في أغلب الحالات سيكون الشكل الظواهري لـ u كافيا. بسبب بساطته يشيع استخدام كمون LJ في وصف ونمذجة مثل هذه التفاعلات والذي يعطى بالعبارة [1]:

$$u(r_{ki}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ki}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ki}} \right)^{6} \right] \tag{4.3}$$

إذن القوة المطبقة من الذرة k على الذرة i هي [1]:

$$\overrightarrow{f_{k,i}} = -\overrightarrow{\bigtriangledown}_{k,i} \, u(r_{ki}) = \frac{24\epsilon}{r_{ki}} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r_{ki}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ki}} \right)^{6} \right] \overrightarrow{e}_r \tag{5.3}$$

يمكن كتابة عبارة القوة $\overrightarrow{f_{k,i}}$ بين الذرتين k و i من الشكل [1]:

$$\begin{aligned}\overrightarrow{f_{k,i}} &= f_{k,i}\ \frac{\overrightarrow{r}_{ki}}{r_{ki}} \\ &= f_{k,i}\ \left(\frac{x_k - x_i}{r_{ki}}\ \overrightarrow{e}_x\ +\ \frac{y_k - y_i}{r_{ki}}\ \overrightarrow{e}_y\right) \\ &= f_{k,i}\ (\cos(\theta_{ki})\ \overrightarrow{e}_x\ +\ \sin(\theta_{ki})\ \overrightarrow{e}_y)\end{aligned} \tag{6.3}$$

القوة الإجمالية المطبقة على الذرة i هي عبارة عن الجمع الشعاعي لجميع القوى المطبقة على هاته الذرة من طرف الذرات الأخرى للنظام. إذن يمكن كتابة مركبات التسارع للذرة i كما يلي [1]:

$$\begin{aligned}a_{x,i} &= \frac{1}{m}\ \sum_{k\neq i} f_{k,i}\cos(\theta_{k,i}) \\ &= \frac{1}{m}\ \sum_{k\neq i} f_{k,i}\frac{x_k - x_i}{r_{ki}} \\ &= \frac{24\epsilon}{m}\ \sum_{k\neq i}\frac{x_k - x_i}{r_{ki}^2}\left[2\left(\frac{\sigma}{r_{ki}}\right)^{12}\ -\ \left(\frac{\sigma}{r_{ki}}\right)^{6}\right]\end{aligned} \tag{7.3}$$

بنفس الطريقة نجد $a_{i,y}$:

$$\begin{aligned}a_{y,i} &= \frac{1}{m}\ \sum_{k\neq i} f_{k,i}\sin(\theta_{k,i}) \\ &= \frac{1}{m}\ \sum_{k\neq i} f_{k,i}\frac{y_k - y_i}{r_{ki}} \\ &= \frac{24\epsilon}{m}\ \sum_{k\neq i}\frac{y_k - y_i}{r_{ki}^2}\left[2\left(\frac{\sigma}{r_{ki}}\right)^{12}\ -\ \left(\frac{\sigma}{r_{ki}}\right)^{6}\right]\end{aligned} \tag{8.3}$$

3.3 الوحدات المختزلة:

لتسهيل وتبسيط حساب الكميات الفيزيائية المختلفة في شفرة الفورتران نختار σ و ϵ كوحدات للمسافة والطاقة على الترتيب، أيضا بالنسبة لوحدة الكتلة m فهي كتلة ذرة واحدة من الأرغون. أما باقي الكميات الفيزيائية تقاس بوحدات مشتقة من الوحدات الثلاث السابقة. على سبيل المثال تقاس السرعة بـ: $(\epsilon/m)^{\frac{1}{2}}$ ،الزمن بـ: $\sigma(m/\epsilon)^{\frac{1}{2}}$ ودرجة الحرارة بـ: (ϵ/k_B). الوحدات المختزلة تعطى بـ [1]:

$$\sigma = \epsilon = m = 1 \tag{9.3}$$

من أجل ذرات الأرغون:

$$\sigma = 3.4\ 10^{-10}(m)\ \ ;\ \ \epsilon = 1.65\ 10^{-21}(J)\ \ ;\ \ m = 6.69\ 10^{-26}(Kg) \tag{10.3}$$

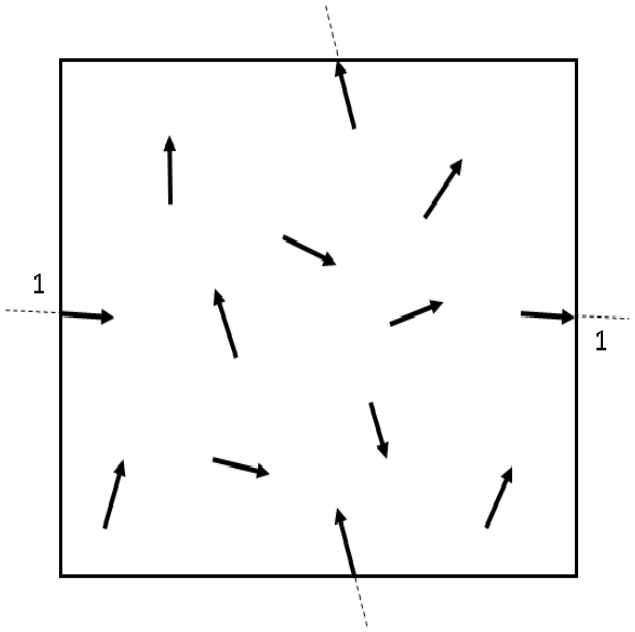
وهكذا :

$$\sigma(m/\epsilon)^{\frac{1}{2}} = 2.17\ 10^{-12}(s)\ \ ;\ \ (\epsilon/m)^{\frac{1}{2}} = 150.05(m/s)\ \ ;\ \ \epsilon/k_B = 120(K) \tag{11.3}$$

4.3 الشروط الحدودية الدورية:

إن عدد الذرات في نظام حقيقي كبير جدا فهو من رتبة 10^{23}. إذا كانت ذرات النظام محاطة بصندوق فإن تفاعلها مع جدرانه مهمل أمام تفاعل الذرات فيما بينها. بالنسبة لأجهزة الكمبيوتر المتوفرة حاليا فإنه يجب التقيد بالأنظمة التي تحتوي على عدد صغير نسبياً من الذرات من رتبة $[10^5, 10^3]$ وفي هذه الحالة تفاعل الذرات مع جدران الصندوق معتبر ولا يمكن إهماله. وللحد من التفاعل بين الذرات والحواف نعتبر الصندوق عبارة عن تورس لا يحتوي على حواف [4,1].

ليكن L_x و L_y هي أبعاد الصندوق على المحور x و y على الترتيب. و كما هو موضح في الشكل (1.3) إذا اجتازت ذرة أحد جدران الصندوق، على سبيل المثال الذرة التي تحمل الرقم 1 فإنها تعيد الدخول إلى الصندوق من الجدار المقابل في نفس الترتيبة أو الفاصلة ـ على حسب الجدار ـ [4,1].



شكل 1.3: الشروط الدورية الحدودية.

ولتلخيص كل ماسبق عدديا فإنه يتم طرح طول الصندوق في الاتجاه الذي اجتازته الذرة على النحو التالي [1]:

$$\begin{aligned} &if\ (x > L_x)\ \ then\ \ x = x - L_x \\ &if\ (x < 0)\ \ then\ \ x = x + L_x \end{aligned} \tag{12.3}$$

$$\begin{aligned} &if\ (y > L_y)\ \ then\ \ y = y - L_y \\ &if\ (y < 0)\ \ then\ \ y = y + L_y \end{aligned} \tag{13.3}$$

أقصى مسافة فصل بين جسيمين على المحور x هي $\frac{L_x}{2}$ بينما على المحور y هي $\frac{L_y}{2}$:

$$\begin{aligned} &if\ (x_{ij} > \frac{L_x}{2})\ \ then\ \ x_{ij} = x_{ij} - L_x \\ &if\ (x_{ij} < -\frac{L_x}{2})\ \ then\ \ x_{ij} = x_{ij} + L_x \end{aligned} \tag{14.3}$$

$$\begin{aligned} &if\ (y_{ij} > \frac{L_y}{2})\ \ then\ \ y_{ij} = y_{ij} - L_y \\ &if\ (y_{ij} < -\frac{L_y}{2})\ \ then\ \ y_{ij} = y_{ij} + L_y \end{aligned} \tag{15.3}$$

5.3 خوارزمية فرلات:

إن اختيار الخوارزمية المناسبة من المراحل المهمة لحل معادلات الحركة عدديا وهو مرتبط بالمشكل المراد حله، ونظرا لاهتمام الديناميك الجزيئي بحساب عدد كبير جدا من الخطوات الزمنية، سنختار خوارزمية فرلات لسرعة الحساب فيها، بالإضافة إلى دقة نتائجها مقارنة مع الخوارزميات الأخرى المحسوبة في الفصل الأول، حيث أن الخطأ فيها من رتبة $(\Delta t)^4$، كما أنها تجعل الطاقة محفوظة. طريقة فرلات لاتحتاج إلى حساب السرعات للحصول على المواضع ولكن سنقوم بحسابها قصد حساب الطاقة [4,1].

لذلك فإنه من أجل ذرة i وحسب المعادلة (35.1) تكتب خوارزميات المركبات (x_i, y_i) كالتالي [1]:

$$x_{i,n+1} = 2x_{i,n} - x_{i,n-1} + (\Delta t)^2 a_{x,i,n} \tag{16.3}$$

$$y_{i,n+1} = 2y_{i,n} - y_{i,n-1} + (\Delta t)^2 a_{y,i,n} \tag{17.3}$$

تعطى خوارزميات القوة والتسارع بـ [1]:

$$f_{k,i,n} = \frac{24\epsilon}{r_{ki,n}} \left[2\left(\frac{\sigma}{r_{ki,n}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ki,n}}\right)^{6} \right] \tag{18.3}$$

$$a_{x,i,n} = \frac{1}{m} \sum_{k \neq i} f_{k,i,n} \frac{x_{k,n} - x_{i,n}}{r_{ki,n}} \tag{19.3}$$

$$a_{y,i,n} = \frac{1}{m} \sum_{k \neq i} f_{k,i,n} \frac{y_{k,n} - y_{i,n}}{r_{ki,n}} \tag{20.3}$$

مسافة الفصل بين ذرتين تكتب من الشكل [1]:

$$r_{ki,n} = \sqrt{(x_{k,n} - x_{i,n})^2 + (y_{k,n} - y_{i,n})^2} \tag{21.3}$$

أما بالنسبة للسرعة ومركباتها فتحسب باستخدام المعادلات [13]:

$$v_{x,i,n} = v_{x,i,n-1} + \Delta t \; a_{x,i,n} \tag{22.3}$$

$$v_{y,i,n} = v_{y,i,n-1} + \Delta t \; a_{y,i,n} \tag{23.3}$$

$$v_{i,n} = \sqrt{v_{x,i,n}^2 + v_{y,i,n}^2} \tag{24.3}$$

من الملاحظ أن خوارزمية فرلات ليست ذاتية البدء، بمعنى آخر فإنه بالإضافة إلى الشروط الإبتدائية ($v_{x,i,1}$, $y_{i,1}$, $x_{i,1}$ و $v_{y,i,1}$) يلزمنا معرفة ($y_{i,2}$, $x_{i,2}$) لكي تبدأ الخوارزمية، والتي يمكن حسابها باستخدام خوارزمية أولر [1]:

$$x_{i,2} = x_{i,1} + \Delta t \; v_{x,i,1} \tag{25.3}$$

$$y_{i,2} = y_{i,1} + \Delta t \; v_{y,i,1} \tag{26.3}$$

6.3 محاكاة توزيع ماكسويل لغاز كلاسيكي ونتائجها العددية:

للاقتراب من الوصف الجيد لنظام حقيقي يجب إثبات أن طريقة MD تحاكي التجارب الواقعية عن طريق دراسة حالة اقتراب غاز من التوازن الحراري، والذي يتميز بدرجة حرارة T عند هذه الحالة. لحساب هذه الأخيرة تستخدم نظرية التوزيع المتساوي التي تنص على أن متوسط الطاقة الحركية لكل تربيع درجة حرية في الغاز عند التوازن الحراري تساوي $(k_BT/2)$، بعبارة أخرى [1]:

$$\frac{1}{2}k_BT = \frac{1}{d}\left\langle \frac{1}{2}m\overrightarrow{v}^2 \right\rangle \tag{27.3}$$

المتوسط $\langle\ \rangle$ يمكن حسابه بطريقتين مختلفتين لكنهما متكافئتين. يمكننا تتبع حركة ذرة واحدة وحساب المتوسط الزمني لطاقتها الحركية. أيضا نتحصل على نفس النتيجة بأخذ متوسط الطاقة الحركية على مختلف الذرات. في الحالة الأخيرة نكتب:

$$\frac{1}{2}k_BT = \frac{1}{dN}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}m\overrightarrow{v_i}^2 \tag{28.3}$$

هناك طريقة أخرى لقياس درجة الحرارة T من خلال دراسة توزيع سرعات الذرات، فعند التوازن الحراري يخضع الغاز الكلاسيكي إلى توزيع ماكسويل، بالنسبة لنظام ثنائي البعد يعطى توزيع السرعات كالتالي [4,1]:

$$P(v) = C\frac{v^2}{k_BT}\,e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}} \tag{29.3}$$

$$P(v_x) = C_x\frac{1}{\sqrt{k_BT}}\,e^{-\frac{mv_x^2}{2k_BT}} \tag{30.3}$$

$$P(v_y) = C_y\frac{1}{\sqrt{k_BT}}\,e^{-\frac{mv_y^2}{2k_BT}} \tag{31.3}$$

حيث $P(v)$ هو الاحتمال لكل وحدة v لإيجاد ذرة بسرعة v. بينما $P(v_{x,y})$ هو الاحتمال لكل وحدة $v_{x,y}$ لإيجاد ذرة بسرعة $v_{x,y}$. C و $C_{x,y}$ ثوابت يتم تحديدها باستخدام شروط التنظيم [4,1].

يمكن الحصول على درجة الحرارة أيضا من خلال تحديد موقع الذروة لتوزيع ماكسويل الموضح في العبارة (29.3) كالتالي:

$$\left.\frac{dP}{dv}\right|_{v=v_{peak}} = 0 \tag{32.3}$$

$$\begin{aligned}\frac{dP}{dv} &= \frac{d}{dv}\left(C\frac{v^2}{k_BT}e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}\right)\\ &= \frac{2Cv}{k_BT}e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}} - \frac{Cmv^3}{(k_BT)^2}e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}\\ &= \left(\frac{2}{k_BT} - \frac{mv^2}{(k_BT)^2}\right)\,Cve^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}\end{aligned} \tag{33.3}$$

من المعادلتين (32.3) و (33.3) نجد أن:

$$\frac{2}{k_BT} - \frac{mv_{peak}^2}{(k_BT)^2} = 0 \tag{34.3}$$

$$\frac{2}{\cancel{k_B T}} = \frac{m v_{peak}^2}{(k_B T)^{\cancel{2}}} \tag{35.3}$$

$$k_B T = \frac{1}{2} m v_{peak}^2 \tag{36.3}$$

إن العبارة الأخيرة (36.3) توضح لنا العلاقة بين درجة الحرارة T والسرعة v من خلال منحنى توزيع السرعة.

1.6.3 وصف برنامج المحاكاة:

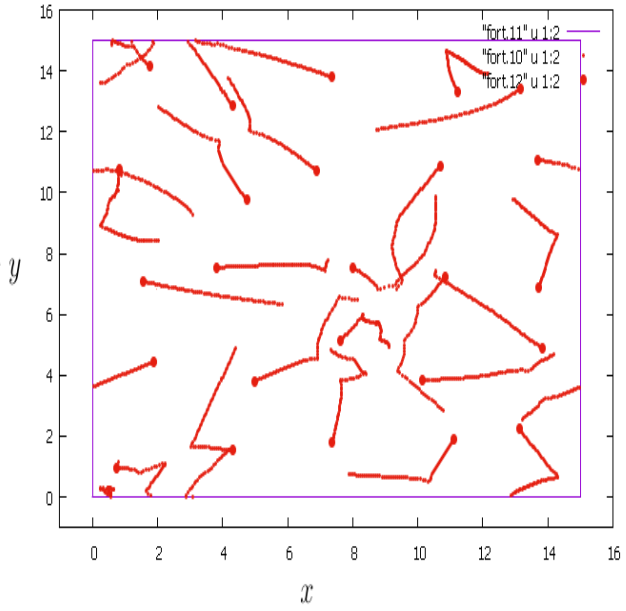
إن برنامج محاكاة الديناميك الجزيئي لتوزيع ماكسويل لسرعات ذرات الأرغون مصمم بلغة الفورتران. كما أننا سنستخدم برنامج الڤنوبلوت لرسم المنحنيات والتوزيعات المختلفة المتحصل عليها. ولإنشاء هذا البرنامج نتبع الخطوات التالية:

1. نأخذ علبة مساحتها $(L_x \times L_y)$.
2. نحدد عدد ذرات الأرغون داخل العلبة بـ N ذرة.
3. نحدد الزمن الكلي للمحاكاة (العدد الكلي للخطوات الزمنية) مع تحديد الخطوة الزمنية Δt.
4. نقسم العلبة إلى شبكة تتشكل من N خلية مساحة كل واحدة منها a^2، حيث أن: $a > 2\sigma$ ، $L_x = a \times N_x$ و $L_y = a \times N_y$.
5. نعيد ترتيب ذرات الأرغون في شعاع $(k = \overline{1, N})$ بدل ترتيبها في مصفوفة (i, j) لتسهيل عملية التشفير أو البرمجة أكثر باستعمال العلاقة: $k = N_y \times (i-1) + j$ ، حيث:
   - $(i-1)$: يحسب عدد الأعمدة قبل العمود المطلوب (الموجودة فيه الذرة).
   - N_y : عدد الذرات في العمود.
   - j : رتبة الذرة في العمود (i).
6. نختار المواضع الابتدائية للذرات عشوائيا، وذلك بوضع كل ذرة في مركز خلية ثم إزاحتها عن طريق إضافة أعداد عشوائية في المجال $\left[-\frac{a}{4}\ ,\ \frac{a}{4}\right]$ إلى إحداثيات الذرات الإبتدائية.
7. نختار السرعات الإبتدائية في اتجاهات عشوائية لكن بطويلة تساوي v_0 من أجل جميع الذرات.
8. نحسب المواضع عند الخطوة الزمنية الثانية باستخدام خوارزمية أولر.
9. نحسب القوى والتسارعات عن طريق برنامج فرعي باستخدام كمون LJ.
10. نحسب المواضع والسرعات الجديدة في البرنامج الأساسي من خلال المواضع والسرعات القديمة والتسارعات المستدعاة من البرنامج الفرعي باستخدام خوارزمية فرلات.
11. ننشئ منحنى توزيع سرعات ذرات الأرغون كل 10000 خطوة زمنية على حدى وذلك عن طريق:
    - إيجاد القيمة العظمى والقيمة الصغرى للسرعات.
    - تقسيم مجال السرعات إلى سلات.
    - تحديد عدد المرات التي تقع فيها قيمة معينة للسرعة داخل سلة معينة.
    - تنظيم السلات ورسم التوزيعات المختلفة.
12. نحسب درجة حرارة النظام باستعمال العلاقة (27.3).

بتكرار الخطوات من 9 إلى 12 نتحصل على النتائج المطلوبة.

2.6.3 النتائج العددية ومناقشتها:

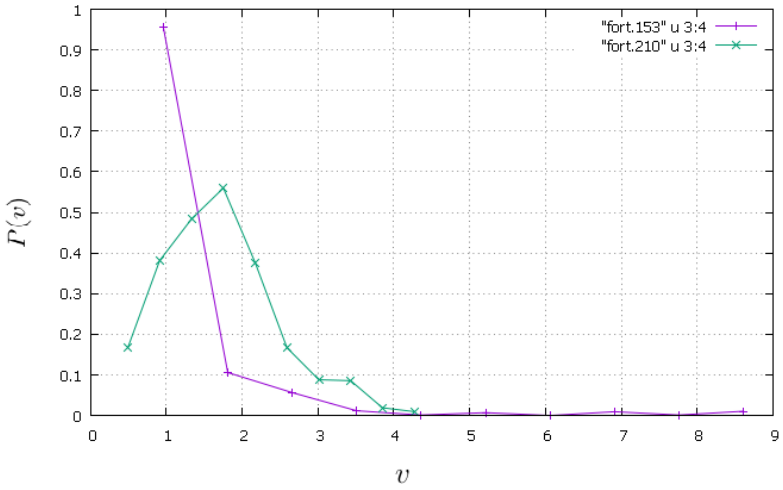
أولا يجب علينا التحقق ما إذا كان تفاعل الذرات يتم فعليا وفق كمون LJ، بالإضافة إلى تحقيق الشروط الحدودية الدورية بشكل صحيح. يوضح الشكل (2.3) مسار 25 ذرة داخل علبة 15×15 خلال عدد من الخطوات الزمنية قدر كل واحدة منها $\Delta t = 0.02$ بسرعة ابتدائية $v_0 = 1$ ذات اتجاهات عشوائية، وتسجيل المواضع بعد كل 3 خطوات.



شكل 2.3: مسار الذرات.

بعد رسم المواضع خلال عدد كاف من الخطوات الزمنية يمكننا تتبع المسارات الفردية للذرات دون الخلط بينها، حيث نلاحظ العديد من التصادمات بين زوجين من الذرات على الرغم من أن النقاط المرسومة لا تلمس بعضها البعض، وهذا راجع إلى التنافر القوي لكمون LJ الذي يمنع اقتراب الذرات بشكل فعال عند مسافات أقل من σ. كما يمكن ملاحظة أن العديد من الذرات التي تخرج من أحد جوانب الصندوق تعيد الدخول إليه من الجانب المقابل. وللحصول على نتائج أفضل لمراقبة الحركة خلال الوقت الحقيقي مع استمرار الحساب يمكننا إنشاء صورة متحركة والتي من المستحيل تضمينها على ورق. من خلال النتائج المتحصل عليها في الشكل (2.3) نستنتج أنه يمكننا بالفعل تتبع حركة مجموعة من الذرات.

الآن علينا إثبات أن هاته المحاكاة لها أي شيء مشترك مع نظام حقيقي، وهو ما إذا كان النظام المدروس يصل إلى حالة توازن مناسبة. نعرض في الشكل (3.3) توزيع السرعة v لـ 100 ذرة في نفس الشروط السابقة للنظام المبين في الشكل (2.3)، حيث قمنا بتسجيل التوزيع بعد كل خطوة زمنية عن طريق حساب المتوسط على الأزمنة $t = 0 \; - \; 0.2$ بالنسبة لمنحنى التوزيع الممثل باللون البنفسجي (الخطوات الزمنية القليلة الأولى)، و$t = 19.8 \; - \; 20$ بالنسبة لمنحنى التوزيع الممثل باللون الأخضر (بعد فترة معتبرة).

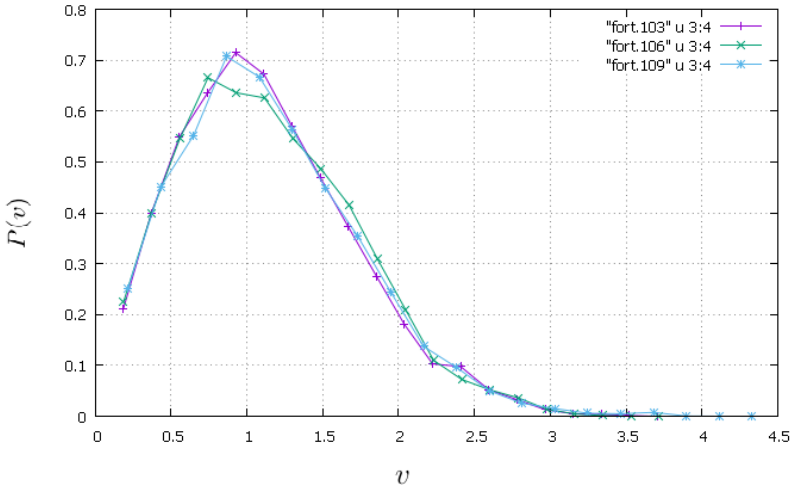


شكل 3.3: توزيع السرعة v لـ 100 ذرة في زمنين مختلفين.

من خلال الشكل (3.3) نلاحظ أن النظام عند الخطوات الزمنية الأولى (المنحنى البنفسجي) لم يصل إلى حالة التوازن الحراري، أي أن الشكل العام للمنحنى لم يحقق توزيع ماكسويل، لكن مع منح النظام وقت أكبر نلاحظ أن المنحنى الأخضر يصل إلى حالة التوازن فهو يقارب الشكل العام لتوزيع ماكسويل. بذلك فإن النظام يتطلب وقت معين للوصول إلى حالة التوازن الحراري والممثل هنا في الفترة $t = 19.8 - 20$، بالإضافة إلى أن توزيعات السرعة تحقق هذا التوازن في لحظة زمنية معينة. ويمكن أيضا الاستنتاج من خلال النتائج المتحصل عليها أن طريقة الديناميك الجزيئي تمكننا من الوصول إلى حالة التوازن الحراري للنظام المدروس.

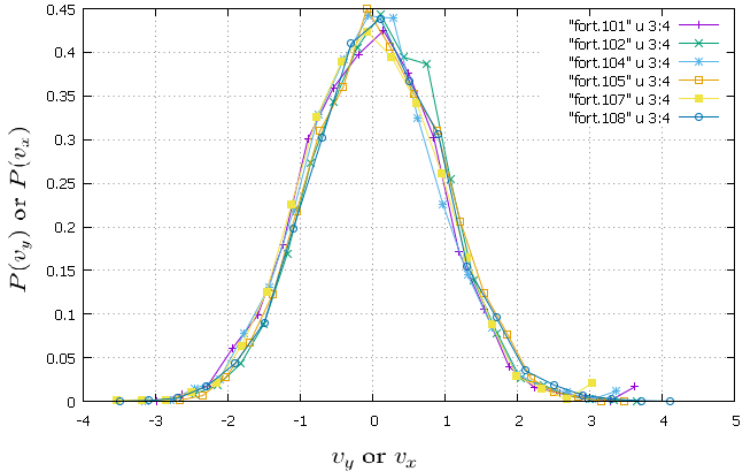
من التجارب والمحاولات التي قمنا بها نلاحظ أن عدد الجسيمات يجب أن يكون كبير بما فيه الكفاية للحصول على التوزيعات المطلوبة عند لحظة زمنية معينة، وبسبب أن عملية المحاكاة محدودة ولا يمكن لأجهزة الكمبيوتر الحالية استيعاب العدد الكبير للذرات سنكتفي بعدد صغير ونعوضه بزيادة زمن المحاكاة الكلي من أجل تسريع عملية الحساب. لذلك فإن نتائج التوزيعات الموالية سيتم تمثيلها خلال فترات زمنية معتبرة لعدد صغير من الذرات للحصول على النتائج المطلوبة.

يظهر الشكلين (4.3) و (5.3) توزيع السرعة v ومركباتها v_x وv_y على الترتيب للذرات ذات الحركة الموضحة في الشكل (2.3)، حيث قمنا بتسجيل هاته التوزيعات بعد كل خطوة زمنية وعن طريق حساب المتوسط على الأزمنة $t = 0 - 200$، $t = 200 - 400$ و $t = 400 - 600$.



شكل 4.3: توزيع السرعة v للذرات.

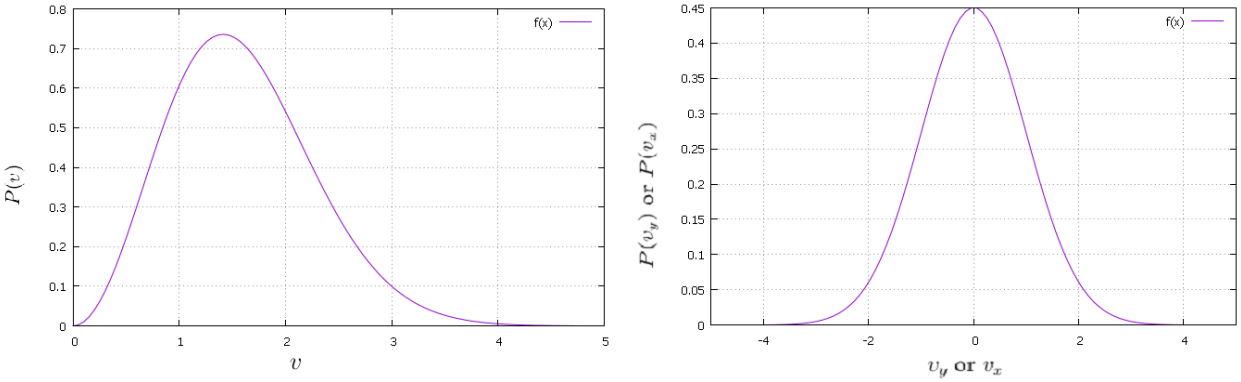
نلاحظ أن الشكل العام للتوزيع الموضح في الشكل (4.3) يمكن تمثيله ووصفه جيدا بالمعادلة (29.3). إذن نستنتج أن النظام وصل بالفعل إلى حالة التوازن الحراري. علاوة على ذلك تم الحفاظ على هذا التوازن خلال الأزمنة المستقبلية بصرف النظر عن التقلبات الإحصائية بسبب العدد الصغير للذرات داخل النظام.



شكل 5.3: توزيع مركبات السرعة v_x و v_y للذرات.

من الملاحظ أيضا أن النتائج الموضحة في الشكل (5.3) تصل للتوزيع المتوقع من أجل $P(v_x)$ و $P(v_y)$ حتى من حالات إبتدائية مختلفة للسرعة. إضافة إلى ذلك فإنه يمكننا الحصول على معلومات حول اتجاه الحركة من هذه التوزيعات. فكمثال على ذلك، إذا أردنا رسم اتجاه السرعات في لحظات زمنية مختلفة فإننا نحتاج إلى مركباتها v_x و v_y.

يمثل الشكل (6.3) النتائج التحليلية لتوزيع السرعات، حيث يوضح المنحنى على اليمين الشكل العام لتوزيع مركبات السرعة حسب العلاقتين (30.3) و (31.3)، أما المنحنى الذي على اليسار يوضح الشكل العام لتوزيع السرعة حسب العلاقة (29.3).

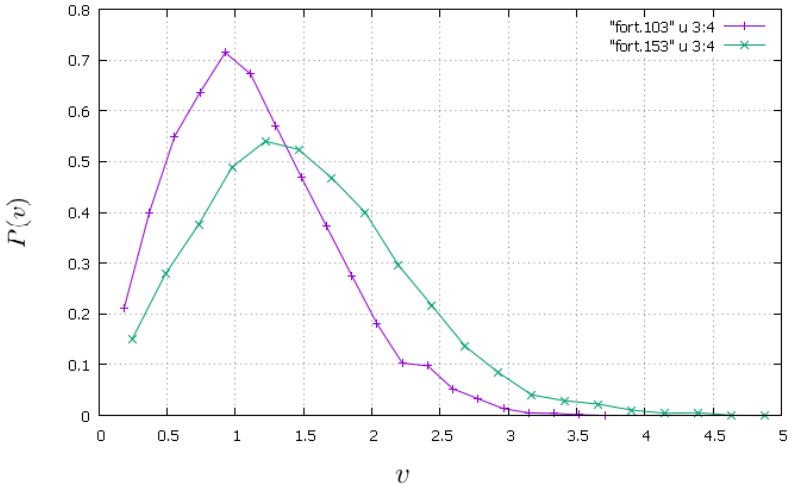


شكل 6.3: النتائج التحليلية لمختلف توزيعات السرعة.

بمقارنة الشكل العام للنتائج العددية المتحصل عليها في الشكلين (4.3) و (5.3) مع النتائج التحليلية الموضحة في الشكل (6.3) نكون قد تمكنا من إثبات المعادلات (29.3)، (30.3) و (31.3) عدديا عن طريق محاكاة الديناميك الجزيئي. إضافة إلى ذلك فإن نتائج التوزيعات المختلفة تعطي لنا أدلة أكثر على أن تقنية الديناميك الجزيئي توفر طريقة لمحاكاة نظام ميكانيكي حقيقي.

كما ذكر سابقا فإن درجة الحرارة T ليست متغير إدخال وبدلا من ذلك يجب قياسها، عادة تستخدم نظرية التقسيم المتساوي لهذا الإجراء، لكن بدلا منها سنستخدم طريقة أخرى وذلك عن طريق نتائج توزيعات السرعة. لتوضيح هذا نعرض في الشكل

(7.3) نتائج توزيعات السرعة التي تم الحصول عليها من عمليتي محاكاة منفصلتين. في الحالة الأولى الممثلة بالمنحنى ذو اللون البنفسجي تم اختيار قيم السرعة الأولية للذرات عشوائيا في المجال $[-1,1]$ ، بينما في الحالة الثانية والممثلة بالمنحنى ذو اللون الأخضر تم اختيارها عشوائيا في المجال $[-1.5,1.5]$ وذلك عن طريق حساب المتوسط على الفترة الزمنية $t = 0,200$.



شكل 7.3: توزيع السرعة v للذرات بحالتين ابتدائيتين مختلفتين للسرعة.

من خلال نتائج الشكل (7.3) نلاحظ أن متوسط سرعات الذرات في الحالة الثانية أكبر من المتوسط في الحالة الأولى التي يكون فيها النظام أبرد حسب نظرية التوزيع المتساوي. أيضا فإن موقع الذروة في الحالة الثانية ينزاح إلى قيم السرعة الأكبر مقارنة بالحالة الأولى، فنتحصل على درجة حرارة أكبر وهذا مايثبت صحة العلاقة (36.3) عدديا، حيث نجد أنه بالفعل يمكننا قياس درجة الحرارة T بالتزامن مع موقع الذروة لتوزيع ماكسويل، فعلى سبيل المثال بالنسبة للحالة الأولى التي تكون فيها $v_{peak} \approx 0.93\ (\epsilon/m)^{\frac{1}{2}}$:

$$T = \frac{m v_{peak}^2}{2k_B} \approx \frac{m \times 0.93^2}{2k_B} = 0.43245\ \epsilon/k_B = 51.894\ K \qquad (37.3)$$

7.3 محاكاة ظاهرة الانصهار ونتائجها العددية:

في المحاكاة السابقة (توزيع ماكسويل) قمنا باستخدام تقنية MD للتحقق من كيفية اقتراب غاز كلاسيكي من حالة التوازن الحراري. أما في هذا الجزء الذي هو الهدف الرئيسي لهذه المذكرة، سنتحقق من حدوث ظاهرة الانصهار باستخدام نفس التقنية السابقة التي تعالج التفاعلات بين الذرات بطريقة واقعية لإعطاء وصف جيد لهاته الظاهرة.

وكما تمت الإشارة إليه سابقا فإن الانتقال الانصهاري يصنف ضمن الانتقالات الطورية من الدرجة الأولى، لذلك من المتوقع الحصول على تغيير مفاجئ في النظام المدروس عندما ينصهر. ولدراسة هاته الظاهرة يجب علينا أولا تحديد المعايير أو الشروط اللازمة التي تضمن حالة صلبة مثالية للنظام تماثل الحالة الحقيقة، وهي:

- **درجة الحرارة المنخفضة:** من أجل خفض درجة الحرارة إلى أقصى حد ممكن يجب أن نبدأ من الحالة التي تكون فيها جميع الذرات في حالة سكون، هذا لا يعني أنها ستبقى جميعها في هاته الحالة، بل ستتحرك استجابة لقوى الذرات المجاورة لها، ومع ذلك سنتحصل على درجة حرارة ابتدائية منخفضة وفقا للمعادلة (27.3).

- **الكثافة المرتفعة:** من أجل تحقيقها يجب الحصول على تجاذب أعظمي بين الذرات، أي أن مسافة الفصل بين الذرات تكون صغيرة نسبيا مقارنة مع الحالة الغازية أو السائلة. وبالنظر لكمون LJ الموضح في الشكل (1.1) نلاحظ أن الحد الأقصى للجذب يحدث عند مسافة فصل تبلغ $1.2\ \sigma = 1.2$ في الوحدات المختزلة. إذن يمكننا اختيار كثافة ذرة واحدة لكل وحدة مساحة مختزلة.

بعد الحصول على نظام صلب يجب ابتكار طريقة لتسخينه من أجل مراقبة عملية الانصهار، وذلك عن طريق زيادة الطاقة الحركية يدويا بمعامل أكبر من الواحد $(R > 1)$. تتم زيادة الطاقة على أنها طاقة حركية بحتة، لكن عند الوصول إلى حالة التوازن ستوزع هذه الطاقة بين طاقة حركية وكامنة للذرات. لذلك فإنه بعد هذه الزيادة يجب إعطاء فرصة للنظام لتحقيق التوازن.

إن الطريقة الملائمة لإعادة قياس الطاقات الحركية هي ضبط الموضع في الخطوة الزمنية السابقة باستخدام المعادلة:

$$r_n = r_{n+1} - R\,(r_{n+1} - r_n) \tag{38.3}$$

على العموم تستخدم إعادة القياس لزيادة درجة الحرارة، كما يمكن استخدامها أيضا لخفض درجة الحرارة لمراقبة عملية التجمد أو التكثيف [4].

1.7.3 وصف برنامج المحاكاة:

إن الخطوات المتبعة في هذا البرنامج تتشابه كثيرا مع خطوات البرنامج السابق، يكمن الاختلاف بينهما فيما يلي:

1. كثافة الذرات داخل العلبة حيث سنأخذ ذرة واحدة في كل وحدة مساحة مختزلة أي: $a^2 = 1$.
2. اختيار المواضع الإبتدائية للذرات لن يكون عشوائيا، فقط سنضع كل ذرة في مركز خلية دون إزاحتها.
3. نعدم السرعات الإبتدائية لجميع الذرات$(v_0 = 0)$.
4. زيادة الطاقة الحركية للذرات يدويا وذلك عن طريق تغيير مواضع الذرات كل 1000 خطوة زمنية باستخدام العباراتين:

$$\begin{aligned} x_n &= x_{n+1} - R(x_{n+1} - x_n) \\ y_n &= y_{n+1} - R(y_{n+1} - y_n) \end{aligned} \tag{39.3}$$

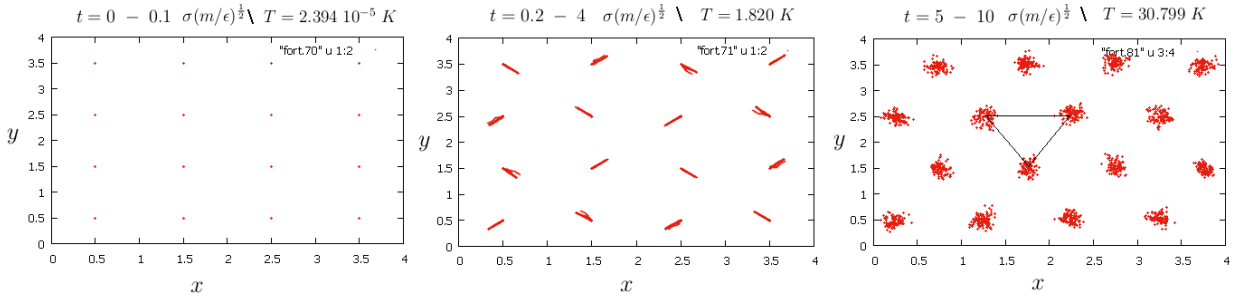
أوالعلاقتين التاليتين:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + R(x_{n+1} - x_n) \\ y_{n+1} &= y_n + R(y_{n+1} - y_n) \end{aligned} \tag{40.3}$$

فكلا الطريقتين تعطيان نفس النتيجة، لكن سنتعمد على العبارتين (39.3) في هذا العمل.

2.7.3 النتائج العددية ومناقشتها:

أولا يجب علينا التحقق ما إذا كان بإمكاننا الوصول إلى حالة صلبة مثالية للنظام المدروس من خلال المعايير المذكورة سابقا. يوضح الشكل (8.3) لقطات من نظام مكون من 16 ذرة في صندوق 4×4 عند درجة حرارة منخفضة، تم التقاطها خلال فترات زمنية مختلفة مشار إليها فوق كل شكل بخطوات زمنية قدرها $\Delta t = 0.005$، حيث سجلنا المواضع بعد كل خطوة زمنية.

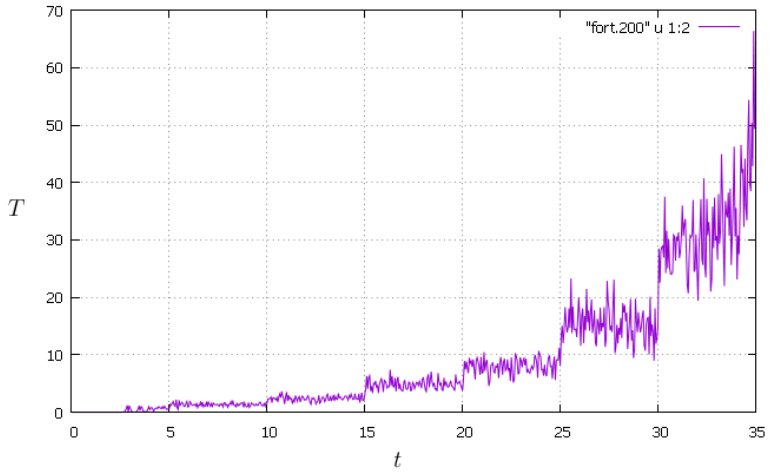


شكل 8.3: تكوين الحالة الصلبة للنظام.

بعد ترتيبنا للذرات في شبكة مربعة خلال الفترات الزمنية القليلة الأولى $(t = 0 \ - \ 0.1)$، نلاحظ من خلال الشكل أقصى اليسار أن هناك انزياح بسيط للذرات بسبب القوى المطبقة على كل ذرة، حيث لا تزال الشبكة المربعة واضحة. بعد منح النظام فترة زمنية كافية $(t = 0.2 \ - \ 4)$، يظهر الشكل في المنتصف أن هناك حركة معتبرة نسبيا، لنصل بعدها إلى حالة التوازن وهذا مايوضحه الشكل أقصى اليمين، بينما لا تزال الذرات تتحرك إلا أن كل ذرة تتحرك في المنطقة الخاصة بها، حيث نرى أن ترتيب الذرات تغير عن الحالة الابتدائية أي الشبكة المربعة إلى الشبكة المثلثية، والتي تثبت وصولنا إلى الحالة الصلبة [4].

نظرا لصغر حجم النظام المدروس، فإن تأثيرات الحدود يمكن أن تؤثر على البنية البلورية للنظام، لأن الشروط الحدودية الدورية المستخدمة تتناسب مع الشبكة المربعة. من الممكن معالجة الشروط الحدودية الدورية بطريقة أعم، حيث نسمح بتغييرها وفقا لنوع الشبكة وشكل النظام، إلا أن هذا الأمر معقد جدا، لذلك سنبقي على الشروط الحدودية الدورية السابقة.

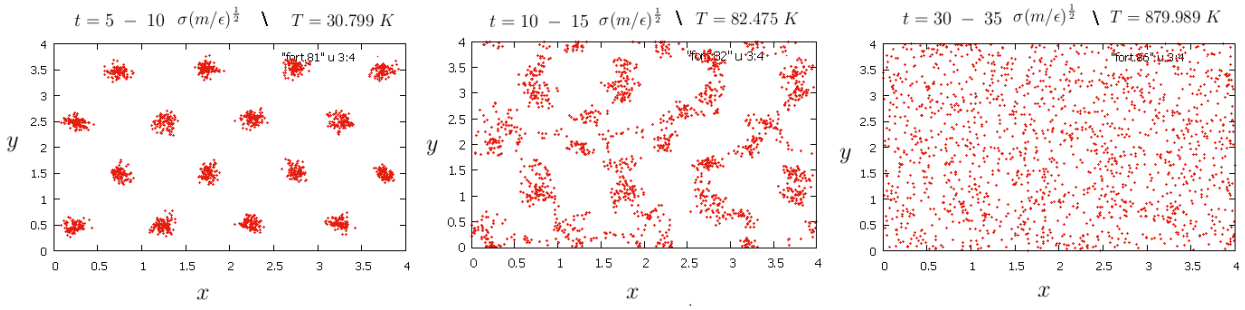
الآن علينا إثبات أن تقنية MD تحاكي ظاهرة الانصهار. وللتحقق من أن عملية التسخين تتم بطريقة صحيحة عن طريق زيادة الطاقة الحركية يدويا بتغيير المواضع كل 1000 خطوة زمنية بمعامل $R = 1.5$، مع تسجيلنا للنتائج بعد كل 10 خطوات. نقوم برسم منحنى تطور درجة الحرارة الممثل في الشكل (9.3).



شكل 9.3: تطور درجة الحرارة خلال عملية الانصهار بمعامل زيادة $R = 1.5$.

من خلال الشكل المبين نلاحظ زيادة T مع مرور الزمن وهذا متوقع خلال عملية الانصهار. بالإضافة إلى ذلك فإن هاته الزيادة تتماشى مع الزيادة اليدوية عبر مراحل للطاقة الحركية للذرات. بالتالي نكون قد أثبتنا صحة نظرية التوزيع المتساوي الموضحة في العلاقة (27.3) عدديا.

وللتأكد من أن الزيادة في درجة الحرارة الممثلة في الشكل (9.3) كافية للوصول إلى الطور السائل، نعرض في الشكل (10.3) لقطات لنفس النظام السابق الممثل في الشكل (8.3) خلال عملية التسخين.



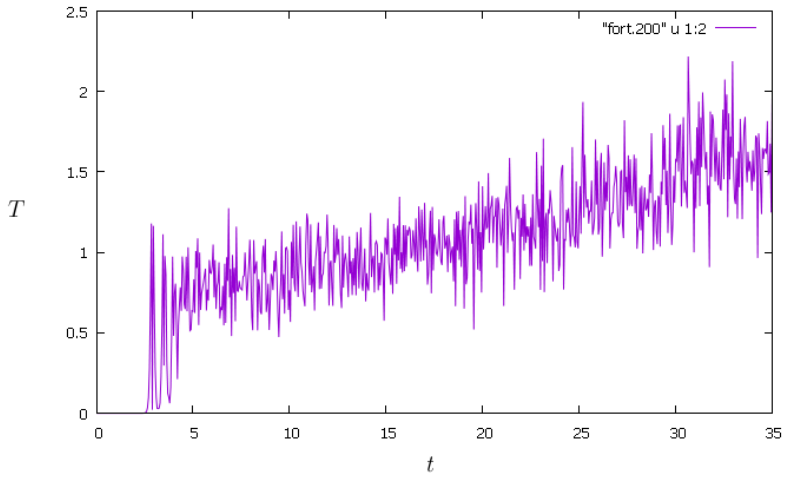
شكل 10.3: الانتقال من الطور الصلب إلى الطور السائل.

إن النظام في الشكل أقصى اليسار لازال في الطور الصلب رغم بداية عملية التسخين. بعد الزيادة في درجة الحرارة نلاحظ بداية اضطراب النظام كما يوضحه الشكل في المنتصف، ومع الاستمرار في عملية التسخين وإعطاء النظام الحرارة الكافية يصبح مضطربا بالكامل وهذا مايوضحه الشكل أقصى اليمين، حيث يأخذ توزيع الذرات شكل الصندوق بترتيب غير منتظم (التوزيع المتجانس للذرات داخل الصندوق)، على عكس الحالة الأولى التي يكون فيها ترتيب الذرات منتظم وبشكل غير متجانس.

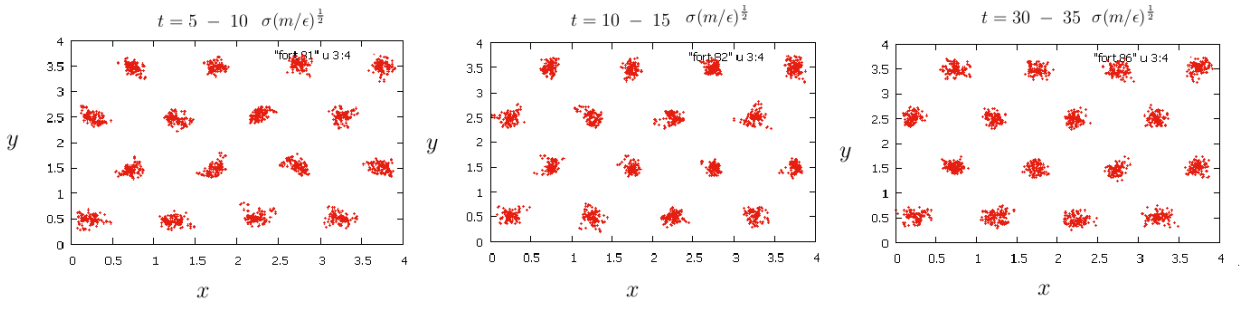
من خلال الملاحظات السابقة يتبين أنه بالفعل قد تمكنا من الوصول إلى الطور السائل للنظام ومراقبة ظاهرة الانصهار عيانيا، ومع ذلك فإن نقطة أو درجة حرارة الانصهار لا يمكن تحديدها إلا إذا رغبنا في ذلك، لأننا نحتاج إلى معرفة المتغيرات الترموديناميكية للنظام التي غالبا ما تكون صعبة التحديد بدقة باستخدام محاكاة الديناميك الجزيئي، ولذلك سنتخلى عليها.

- **ملاحظة:**

أثناء عملية التسخين معامل الزيادة في الطاقة الحركية ليس بالضرورة أن يكون $R = 1.5$، فقد يمكن تغييره من 1.1 إلى 1.5 في هاته المحاكاة، فقط يكمن الاختلاف في الزمن المستغرق لعملية الانصهار. فمثلا بالنسبة للمعاملات $R > 1.5$ يلزمها عدد خطوات كلي صغير لنضمن الوصول إلى الحالة السائلة فلو أبقينا على نفس الزمن بالنسبة للمعاملات الأقل لا نتحصل على النتائج المتوقعة، ربما يكون النظام في الخطوات الزمنية الأخيرة قد انتقل إلى الطور الغازي بسبب الزيادة الكبيرة في درجة الحرارة. أما بالنسبة للشكل (11.3) والذي يمثل تطور درجة الحرارة خلال الزيادة بمعامل $R = 1.1$، من الملاحظ أنه يلزمنا عدد خطوات زمني كبير جدا للوصول إلى الطور السائل بسبب أن الزيادة في درجة الحرارة غير كافية خلال فترة المحاكاة، فمن خلال الشكل (12.3) نرى أن النظام لازال محافظا على الشبكة المثلثية أي أنه لم ينتقل من الطور الصلب بعد، وهذا متوقع فكلما زادت درجة الحرارة تستغرق عملية انصهار المادة أو النظام وقت أقل.



شكل 11.3: تطور درجة الحرارة خلال عملية الانصهار بمعامل زيادة $R = 1.1$.



شكل 12.3: تموضع الذرات داخل النظام خلال الزيادة في السرعة بمعامل $R = 1.1$.

الخلاصة العامة

إن محاكاة الديناميك الجزيئي أداه مهمة جدا لتقريب الوصف الكامل للأنظمة الفيزيائية على المستوى المجهري، والتي يصعب الحساب التحليلي والإحصائي فيها. ولأهمية تقنية المحاكاة هاته ابتدئ هذا العمل في الفصل الأول بتعريف الديناميك الجزيئي، وذكر أهم مجالات تطبيقه، بالإضافة إلى المقارنة بينه وبين التجارب الواقعية، حيث لاحظنا وجود تشابه كبير بين العمليتين في كثير من النواحي. كما قدم شرح مفصل لطريقة محاكاة MD مع ذكر أهم كمونات التفاعل بين الذرات، واستنتجنا الكمون شائع الاستخدام ألا وهو كمون ليونارد جونس لنمذجته الجيدة لمختلف التفاعلات. وتم حساب مختلف الخوارزميات العددية الممكنة وتقدير الخطأ في كل واحدة منها، وبسبب الأخطاء العددية المتراكمة للعدد الكبير من الخطوات الزمنية توصلنا أنه من الأنسب اختيار الخوارزمية الأقل رتبة خطأ والأكبر دقة لهاته المحاكاة وهي خوارزمية فرلات.

قدمت بعدها إحاطة نظرية للانتقالات الطورية من خلال إعطاء مفهوم الطور والانتقال الطوري، مع شرح المخطط الطوري للماء وذكر النقطتين المميزتين له وهما النقطة الثلاثية والنقطة الحرجة. كما تم التطرق إلى أهم تصنيفات الانتقال الطوري، وأكثرها تداولا تصنيفي اهرنفست ولاندو. تستخدم استمرارية وسيط الترتيب في تحديد نوع الانتقال، حيث يكون الانتقال من الدرجة الأولى إذا كان وسيط الترتيب غير مستمر، ويكون الانتقال من الدرجة الثانية إذا كان عكس ذلك. وكمثال على الانتقال الطوري من الدرجة الأولى عرض مفهوم الانتقال صلب-سائل المعروف بظاهرة الانصهار وشرح أهم مايميزها من درجة حرارة ونقطة انصهار. إضافة إلى ذلك تم التعريج على مفهوم الأسس الحرجة وخاصية العالمية التي تحققها هذه الأسس.

وفي الفصل الثالث طبقت تقنية الديناميك الجزيئي لمحاكاة ظاهرة الانصهار وتصرف ذرات غاز الأرغون، بالإضافة إلى التأكد من الوصول إلى حالة توازن حراري مناسبة. حيث تم تقديم وصف برنامجي المحاكاة وذكر كل الشروط اللازمة من قيم ابتدائية وشروط حدودية دورية ومإلى ذلك. حيث تم التوصل في نهاية هذا العمل المتعلق بالديناميك الجزيئي والانتقال الطوري إلى أهم النتائج التالية:

بالنسبة للجزء الأول المتعلق بتوزيع ماكسويل لغاز الأرغون:

- ✓ التمكن من تتبع المسارات الفردية للذرات المتفاعلة بواسطة كمون ليونارد جونس والمحسوبة باستخدام خوارزمية فرلات.
- ✓ الوصول إلى حالة التوازن الحراري المتوقعة حتى مع تغيير السرع الابتدائية. بالإضافة إلى إثبات معادلات توزيعي ماكسويل وغوص عدديا.
- ✓ التمكن من قياس درجة حرارة توازن أي نظام من خلال توزيع ماكسويل بالتزامن مع موقع الذروة فيه باستخدام العلاقة $k_BT = \frac{1}{2}mv_{peak}^2$.

أما بالنسبة للجزء الثاني والمتعلق بظاهرة الانصهار:

- ✓ الوصول إلى حالة صلبة مستقرة مناسبة للانطلاق منها في عملية الانصهار.

- ✓ تم التأكد من الزيادة في الطاقة الحركية المعطاة للنظام والمتجسدة في درجة الحرارة، وإثبات نظرية التوزيع المتساوي عدديا.
- ✓ الحصول على الانتقال الانصهاري أي الوصول إلى الحالة السائلة للنظام ومراقبة عملية الانصهار عيانيا.
- ✓ إمكانية تغيير الوقت المستغرق أثناء عملية الانصهار عن طريق تغيير معامل الزيادة في الطاقة الحركية.

كل هاته النتائج المتحصل عليها تثبت أنه من الممكن استخدام محاكاة الديناميك الجزيئي لدراسة الأنظمة الذرية الميكروسكوبية بقوانين الحركة الكلاسيكية التي تستعمل عادة لدراسة الأنظمة الماكروسكوبية بدلا من قوانين الإحصاء.

المراجع

[1] B. Ydri," Computational Physics ", World Scientific, singapore (2017).

[2] أ. القاضي، "محاكاة حركية الجزيئات وحقل القوى الضبابية"، مذكرة ماجستير، جامعة الملك عبد العزيز، جدة -المملكة العربية السعودية (2011).

[3] F. Betaouaf, "Simulation de Dynamique Moléculaire des fluides denses, application aux mélanges méthane-azote, méthane-néon : Approche de Feynman-Hibbs", Thèse de doctorat, Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen-Algérie- (2015).

[4] N.J.Giordano, H. Nakanishi, "Computational Physics", 2^{nd} Edition, Pearson Prentice Hall, USA (2006).

[5] C. Ngo,H. Ngo, "Physique Statistique Introduction", 3^{rd} Edition, DUNOD, Paris(2008).

[6] ح. عطا الله، "الأسس الحرجة ونموذج أيزينغ"، مذكرة ماستر، جامعة الشهيد حمة لخضر، الوادي - الجزائر (2019).

[7] M. L. Bellac , "Quantum and Statistical Field Theory", Oxford University Press, New York(1991).

[8] D. C. Rapaport, "The Art of Molecular Dynamics Simulation", 2^{nd} Edition, Cambridge University Press, UK (2004).

[9] S.Plimpton,R. Pollock and M. Stevens, "Particle-Mesh Ewald and rRESPA for Parallel Molecular Dynamics Simulations", Researchgate(2000).

[10] D. Frenkel, B. Smit, "Understanding Molecular Simulation From Algorithms to Applications", Volume 1 in the Computational Science series, Academic Press, USA(2002).

[11] M. Allalen, "Molecular Dynamics and Monte-Carlo Simulations of CoPt alloys", Université de Tizi-Ouzou, Tizi-Ouzou - Algerie(2002).

[12] ع. بكوش، "حساب دوال توزيع مشتقات الحقول الكهربائية الموضعية في البلازما باستخدام تقنية التحريك الجزيئي"، مذكرة ماجستير، جامعة الشهيد حمه لخضر، الوادي - الجزائر (2011).

[13] R. Lesar," Introduction to Computational Materials Science Fundamentals to Applications ", Cambridge University Press, UK (2013).

[14] J. Z. Zhang," Theory and Application of Quantum Molecular Dynamics ", World Scientific, Singapore(1999).

[15] ب. يدري، "الواقع والزمن والفيزياء الأساسية"، معهد الفيزياء، جامعة عنابة، الجزائر (2018).

[16] S. Stolen, T. Grande, N. L.Allan, "Chemical Thermodynamics of Materials Macroscopic and Microscopic Aspects", John Wiley & Sons Ltd, England(2004).

[17] C. H. P. Lupis, "Chemical Thermodynamics of Materials", Elsevier Science, USA(1983).

[18] K. Huang, "Introduction to Statistical Physics", Taylor & Francis, London(2001).

[19] M. Heritier, "Mécanique Statistique et Transitions de Phase", D. E. A. de Physique des Solides, Volume .1998-1,1997

[20] S. J. Blundell, K. M. Blundell, "Concepts in Thermal Physics", 2^{nd} Edition, Oxford University Press, UK(2010).

[21] M. Kardar, "Statistical Physics of Fields", Cambridge University Press, UK(2007).

[22] D. W. Oxtoby, H. P. Gillis, A. Campion, "Principles of Modern Chemstry", 7^{th} Edition, BROOKS / COLE Cengage learning, USA(2012).

[23] P. Papon, J. Leblond, P. H. E. Meijer, "Physique des Transitions de Phases Concepts et Applications Cours avec Exercices Corrigés", DUNOD, Paris(1999).

[24] B. Flutz, "Phase Transitins in Materials", Cambridge university Press, UK(2014).

[25] H. E. Stanley, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomene", Oxford University Press, London(1971).

الملخص

الديناميك الجزيئي هي طريقة محاكاة حاسوبية تعتمد على طريقة ميكانيكية لدراسة الأنظمة متعددة الجسيمات، فهي بهذا تحاكي ديناميك هذه الأنظمة بإستخدام معادلات الحركة المجهرية الضرورية لتقدير القوة بين كل جسيمين. يتطلب حساب هذه القوة معرفة كمون التفاعل الذي يعطى بكمون ليونارد جونس. تتضمن المحاكاة بالديناميك الجزيئي حل معادلات الحركة لكل جسيم في النظام باستخدام خوارزمية فرلات.

في هذه المذكرة تم التطرق إلى شرح هذه الطريقة ومبدأ عملها وأهم الشروط الواجب تحققها من أجل محاكاة دقيقة. أُنجزت محاكاة الديناميك الجزيئي لوصف تصرف غاز الأرغون عن طريق دراسة حركة ذراته لمشاهدة وصوله إلى التوازن الحراري. تمت أيضا محاكاة ظاهرة الانصهار بنفس الطريقة انطلاقا من حالة صلبة مناسبة وصولا إلى الحالة السائلة المنشودة. الفكرة المهمة التي تم عرضها هي إمكانية حساب كميات ماكروسوبية إنطلاقا من قوانين كلاسيكية على المستوى المجهري.

الكلمات المفتاحية: محاكاة الديناميك الجزيئي، الانتقال الطوري، كمون ليونارد جونس، خوارزمية فرلات، الانصهار، توزيع ماكسويل.

Abstract

Molecular dynamics is a computer simulation method based on a mechanical approach for studying multiparticle systems. It, therefore, simulates the dynamics of these systems using the microscopic equations of motion that need to estimate the force between any two particles. Calculation of the force requires knowledge of the interaction potential given by a Lennard-Jones potential. A molecular-dynamics simulation consists of solving the equations of motion for every particle in the system using Verlet algorithm.

In this dissertation, the explanation of this method, its principle of work and the most important conditions that must be fulfilled for an accurate simulation have been covered. A molecular dynamics simulations is performed to describe the behavior of Argon gas by studying the motion of its atoms in order to see how it reaches a thermal equilibrium. The melting phenomenon was also simulated in the same way, starting from a suitable solid state until the desired liquid state is established. The most important idea shown in this work is the capability of calculating macroscopic quantities using classical laws of motion at a microscopic level.

Keywords: Molecular dynamics simulation, Phase transition, Lennard Jones ptential, Verlet algorithm, Melting, Maxwell distribution.