

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء



مذكرة ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: الفيزياء

تخصص: فيزياء طاوقية وطاقات متجددة

من إعداد الطالبتين: باشي هاجر، سود صفاء

بعنوان

تقدير معاملات الانتشار لبعض المواد بمحاكاة الديناميكا الجزيئية

نوقشت يوم: 2019/6/24

أمام لجنة المناقشة:

رئيسا	استاد مساعد ا	ا.بوعنان رابح
مناقشا	استاد محاضر ا	د. بلحاج محمد مصطفى
مشرفا	استاد محاضر ا	د. بابا حني أم الخير

الموسم الجامعي 2018-2019

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء



مذكرة ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: الفيزياء

تخصص: فيزياء طاوقية وطاقات متجددة

من إعداد الطالبتين: باشي هاجر، سود صفاء

بعنوان

تقدير معاملات الانتشار لبعض المواد بمحاكاة الديناميكا الجزيئية

نوقشت يوم: 2019/6/24

أمام لجنة المناقشة:

رئيسا	استاد مساعد ا	ا. بوعنان رابح
مناقشا	استاد محاضر ا	د. بلحاج محمد مصطفى
مشرفا	استاد محاضر ا	د. بابا حني أم الخير

الموسم الجامعي 2018-2019

إهداء

بسم الله الرحمن الرحيم

(قل اعملوا فسيرى الله عملكم ورسوله والمؤمنون)

صدق الله العظيم

الهي لا يطيب الليل الا بشكرك ولا يطيب النهار الا بطاعتك .. ولا تطيب اللحظات الا بذكرك .. ولا تطيب الاخرة الا بعفوك .. ولا تطيب الجنة الا برويتك الله جل جلاله الى من بلغ الرسالة وادى الامانة .. ونصح الامة الى نبي الرحمة ونور العالمين .. سيدنا محمد صلى الله عليه وسلم

الى من كلله الله بالهبة والوقار . الى من علمني العطاء بدون انتظار . الى من احمل اسمه بكل افتخار . ارجو من الله ان يمد في عمرك لترى ثمارا قد حان قطافها بعد طول انتظار . وستبقى كلماتك نجوم اهتدي بها اليوم وفي الغد والى الابد . والدي العزيز

الى ملاكي في الحياة .. الى معنى الحب والى معنى الحنان والتفاني .. الى بسمه الحياة وسر الوجود الى من كان دعائها سر نجاحي وحنانها بلسم جراحي الى اغلى الحبايب امي الحبيبة

الى من يحملون في عيونهم ذكريات طفولتي وشبابي اخوتي واخواتي والى كل صديقاتي والى كل الكتاكيت الصغار (حفصة، سارة، حيدر، بيسان، غفران، سندس، اريج الجنة، نهال، اسماء، نور

الايمان)

الى استاذتي بابا حني ام الخير

إهداء

الى ينبوع الصبر والتفاؤل والامل الى كل من في الوجود
بعد الله ورسوله امي الغالية
الى حكمتي وعلمي ..الى ادبي وحلمي الى طريقي
المستقيم والدي العزيز
الى سندي وقوتي وملاذي بعد الله الى من اثروني على
نفسهم الى من علموني علم الحياة الى من اظهروا لي ما
هو أجمل من الحياة اخوتي واخواتي الى الكتاكيت العائلة
(اسيل، حسام الدين، عبد الرحمان، عبد الودود، عبد
المنعم، الياس، دعاء)
الى من كانوا ملاذي وملجئي الى من تذوقت معهم أجمل
اللحظات الى من سأفتقدهم واتمنى ان يفتقدوني صديقاتي
الى من جعلهم الله اخوتي بالله ومن احببتهم بالله طلاب
قسم الفيزياء
الى من لم اعرفهم ولن يعرفونني والى من اتمنى اذكرهم
اذا ذكروني الى من اتمنى ان تبقى صورهم في عيوني
الى استاذتي بابا حني ام الخير

الشكر والعرفان

الحمد لله الذي هدانا وما كنا لنهتدي لو أن هدانا الله.

نشكر المولى القدير ذي الجودي والفضل الكبير على توفيقه لنا لإتمام هذا العمل.
نتقدم بجزيل الشكر والعرفان لكل من ساهم في اعداد هذه المذكرة وخاصة الأستاذة "بابا
حني ام الخير" استاذة محاضرة بجامعة قاصدي مرباح على كل الجهود التي بذلتها
والنصائح السامية التي قدمتها لنا خلال مسيرتنا في أنجاز هذه المذكرة
كما نشكر الأستاذ

" بوغان رابح " رئيس لجنة المناقشة، كما اشكر الأستاذ

" بلحاج محمد مصطفى " الذي شرفنا بقبول مناقشة هذه المذكرة

" خلفاوي فتحي " أستاذ تعليم العالي على مساعدته لنا بتوجيهاته ونصائحه

كما نشكر كل أعضاء فريق البحث بمخبر الأشعاع والبلازما وفيزياء السطوح بقسم الفيزياء
لجامعة قاصدي مرباح ورقلة.

فهرس الاشكال

- 4 الشكل (1.1) ظاهرة الانتشار
- 5 الشكل (2.1) حالات المادة
- 18 الشكل (3.1) مسار جزيء يتعرض للتصادم
- 18 الشكل (4.1) اسطوانة
- 24 الشكل (5.1) الشروط الحدودية في ثلاث ابعاد
- 26 الشكل (1.2) خلية محاكاة
- 31 الشكل (2.2) مخطط الخوارزمية
- 34 الشكل (1.3) تغيرات الفرق بين المواضع الابتدائية ولانتقالية بدلالة الزمن
- 35 الشكل (2.3) تغيرات معامل الانتشار بدلالة عدد جزيئات الخلية
- 36 الشكل (3.3) تغيرات معامل الانتشار بدلالة زمن المحاكاة
- 37 الشكل (4.3) تغيرات معامل الانتشار بدلالة درجة الحرارة في ثبوت الضغط
- 38 الشكل (5.3) تغيرات معامل الانتشار بدلالة الضغط في ثبوت درجة الحرارة
- 39 الشكل (6.3) تغيرات معامل الانتشار الهيدروجين في الاكسجين بدلالة درجة الحرارة
- 39 الشكل (7.3) تغيرات معامل انتشار الهيدروجين في الاكسجين بدلالة الضغط

فهرس الجداول

- 5 جدول(1.1) مقارنة بين خصائص حالات المادة
- 8 جدول (2.1) معامل الانتشار في اوساط مختلفة
- 9 جدول (3.1) معامل الانتشار لبعض المواد
- 9 جدول (4.1) الارتباطات لحساب معامل الانتشار في الخلائط الثنائية الغازية
- 10 جدول (5.1) العلاقات لحساب معامل الانتشار في الخلائط متعددة المكونات
- 11 جدول (6.1) علاقات لحساب معامل الانتشار في خليط ثنائي غير كهربائي
- 11 جدول (7.1) علاقات معامل الانتشار في محلول ثنائي مركز غير شاردي
- 33 جدول (1.3) قيم النتائج المتحصل عليها من البرنامج الخاصة بالهيدروجين
- 34 جدول (2.3) المقارنة بين نتائج القيم النظرية والتجريبية لمعامل الانتشار
- 35 جدول(3.3) تغيرات حجم الخلية وكمية المادة بدلالة عدد الجزيئات
- 36 جدول(4.3) تغيرات حجم الخلية وكمية المادة بدلالة درجة الحرارة
- 37 جدول(5.3) تغيرات حجم الخلية وكمية المادة بدلالة الضغط
- 38 جدول (6.3) قيم بعض المقادير المستعملة في المحاكاة بالنسبة لانتشار الهيدروجين في الاكسجين

فهرس محتويات

I	الاهداء
III	الشكر والعرفان
IV	فهرس الاشكال
V	فهرس الجداول
VI	فهرس المحتويات
1	المقدمة العامة

الفصل الاول: عموميات حول الانتشار ومعامل الانتشار

3	المقدمة
3	1.1 ظاهرة انتقال المادة
3	2.1 تعريف تدفق المادة
3	3.1 الانتشار
3	1.3.1 تعريف الانتشار
4	2.3.1 حالات المادة
6	3.3.1 انتشار الغازات
6	4.3.1 انتشار السوائل
6	5.3.1 انتشار المواد الصلبة
6	6.3.1 قانون فيك للانتشار
7	1.6.3.1 قانون فيك الأول
7	2.6.3.1 قانون فيك الثاني
8	4.1 معامل الانتشار
8	1.4.1 تعريف معامل الانتشار
8	2.4.1 ترتيب سرعة الانتشار حسب حالة المادة
9	3.4.1 معامل الانتشار في الغازات
10	4.4.1 معامل الانتشار للسوائل
12	5.4.1 معامل الانتشار للمواد الصلبة

13	6.4.1 العوامل المؤثرة على معامل الانتشار
14	5.1 النظرية الحركية للغازات
14	1.5.1 قوانين الغاز المثالي
14	1.1.5.1 قانون بويل
14	2.1.5.1 قانون شارل وغي لوساك
14	3.1.5.1 فرضية وقانون افوجادرو
15	4.1.5.1 قانون الغاز المثالي
16	2.5.1 الضغط في الغاز
17	3.5.1 درجة حرارة الغاز
17	4.5.1 توزيع ماكسويل – بولتزمان للسرع
17	1.4.5.1 السرعة الاكثر احتمالا
17	2.4.5.1 السرعة المتوسطة
17	3.4.5.1 الجذر التربيعي لمتوسط مربع السرعة الجزيئية
18	5.5.1 متوسط المسار الحر لجزيئات الغاز
19	6.5.1 قوة VanderWaals
19	1.6.5.1 كمون ديبياي Debye
19	2.6.5.1 كمون لندن London
20	3.6.5.1 كمون Keesom
20	6.1 المحاكاة العددية
20	1.6.1 مفهوم المحاكاة
21	2.6.1 طرق المحاكاة
21	1.2.6.1 طريقة مونتني كارلو
21	2.2.6.1 طريقة الديناميكا الجزيئية
21	3.6.1 خوارزمية فيرلي
21	1.3.6.1 خوارزمية فيرلي بخطوتين
22	2.3.6.1 خوارزمية فيرلي بخطوة
23	4.6.1 الشروط الحدودية

الفصل الثاني: المحاكاة بالديناميكا الجزيئية

26	المقدمة
26	1.2 الوصف الفيزيائي لخلية المحاكاة
27	2.2 الوصف الفيزيائي للظاهرة
27	3.2 طاقة التفاعل بين اي ذرتين او جسمين او جزيئين i و k مفصولتين بمسافة r_{ki}
28	4.2 القوة التي تطبقها الذرة k على الذرة i
28	5.2 النموذج الرياضي
28	1.5.2 معادلات الحركة
29	2.5.2 معادلات خوارزمية فيرلي
29	3.5.2 المواضع والسرعات الابتدائية
29	1.3.5.2 المواضع الابتدائية
30	2.3.5.2 السرعات الابتدائية
30	4.5.2 الشروط الحية الدورية
30	6.2 مخطط تصميم البرنامج

الفصل الثالث : النتائج ومناقشتها

33	المقدمة
33	1.3 الانتشار الذاتي لغاز الهيدروجين
34	1.1.3 منحنيات خاصة بالانتشار الذاتي للهيدروجين مع الملاحظات
34	3. 1.1.1 مواضع الجزيئات
38	2.3 انتشار الهيدروجين في الاكسجين
39	1.2.3 منحنيات خاصة بانتشار الهيدروجين في الاكسجين مع الملاحظات
41	خلاصة عامة
43	قائمة المراجع

مقدمة عامة

مقدمة عامة

في الممارسة العملية، يلعب نقل المواد دورا مهما في العديد من العمليات (الاستخلاص، التجفيف، التبلور)، كل هذه العمليات تعتمد على نقل المواد التي من الضروري معرفة طريقة نقلها. يتم نقل المواد وفقا لطريقتين: النقل عن طريق الحمل الحراري Convection والنقل عن طريق الانتشار Diffusion.

تم اكتشاف الانتشار خلال ذروة الثقافة اليونانية القديمة. اقتنع ديموكريطوس واناكسوغور بان أي مادة تتكون من ذرات. مجموعة متنوعة من المواد التي هي مشتركة في الطبيعة، ووضحوا ان المركبات بين كل ذرة فردية. افترضوا ان هذه الجزيئات يمكن ان تختلط، وتشكيل مواد جديدة. من بين مؤسسي نظرية الحركة الجزيئية، التي شرحت الية الانتشار، لعب ميخائيل لوفونوسوف دورا خاصا [1].

في عام 1827 لاحظ عالم النبات روبرت براون ان حبوب الطلع المعلقة في الماء تتكون من جزيئات صغيرة متحركة بواسطة حركة سريعة ومنظمة وهذا ما يسمى بوسيلة نقل طبيعية تسمى الانتشار الجزيئي للكتلة [2].

في عام 1855 اقترح العالم ادولف فيك قوانين تجريبية مستوحاة من قانون فورييه للحرارة.

في هذه الدراسة ندرس ظاهرة انتشار المواد ونعرف معاملات الانتشار كما نعرض طرق تقديرها. نقوم في هذا العمل بتقدير معاملات الانتشار لبعض المواد باستعمال المحاكاة بالديناميكا الجزيئية.

ينقسم هذا العمل الى ثلاث فصول:

◀ الفصل الأول: نتطرق فيه الى دراسة عامة لظاهرة الانتشار ونعرف معامل الانتشار لمختلف حالات المادة ونقدم مختلف الطرق لتقدير هذه المعاملات النظرية منها التجريبية وباستعمال المحاكاة.

◀ الفصل الثاني: نتطرق فيه الى عرض طريقة المحاكاة بالديناميكا الجزيئية ونشرح اهم خطوات اجرائها. نقدم في الفصل الثاني مخطط خوارزمية فيرلي المستعملة في انجاز برنامج بلغة الفور ترون. الكمون المستعمل في المحاكاة هو كمون (فاندرفالس) الذي يصف التفاعل بين ذرات، جزيئات او شوارد مختلف المواد.

◀ الفصل الثالث نقوم فيه بعرض مختلف النتائج المتحصل عليها وناقشها كما نقارن بين بعض هذه النتائج وبين قيم نظرية او تجريبية موجودة في اعمال اخرى.

الفصل الأول:
عموميات حول انتشار المادة ومعامل الانتشار

الفصل الأولعموميات حول انتشار المادة ومعامل الانتشارالمقدمة:

المادة هي كل ما له كتلة وحجم ويشغل حيز في الفراغ تتواجد المواد في صورة صلبة وسائلة وغازية. ويتم نقل المواد اما عن طريق الانتشار او الحمل الحراري. فالأولى هي ظاهرة جزئية والنظر فيما يتعلق بالحركة الشاملة اما عن الثانية فهي تنطوي فقط على نقل المواد المجهرية للمادة وتتم بمساهمة الطاقة الخارجية، وفي هذا الفصل سوف نقدم لمحة عامة عن انتشار المواد وتحديد معاملات الانتشار لمختلف حالات المادة [3].

1.1 ظاهرة انتقال المادة :

تحدث ظاهرة انتقال المادة عندما يكون هناك اختلاف في تركيز مادة معينة بين موضعين من طور لآخر أو في الطور نفسه، ونستطيع أن نجدها في العديد من المواقف التي نمر بها يوميا، فمثلا عندما نضع السكر في كوب من القهوة فنرى أن السكر يذوب وينتشر فيه حتى وان لم يتم تقلبيه لكن هذا سيستغرق بعضا من الوقت.

وتكون آلية حدوث هذا الانتقال من طور لآخر أو في نفس الطور متماثلة سواء كان (حالة المادة) غازا أو سائلا أو صلبا [4].

2.1 تعريف تدفق المادة :

يمكن أن يعبر عنها بكمية المادة أو عدد المولات التي تعبر وحدة السطح في وحدة الزمن نرسم له ب N ووحدته $\text{kg/m}^2 \cdot \text{s}$ أو $\text{mol/m}^2 \cdot \text{s}$ [4].

3.1 الانتشار (Diffusion)1.3.1 تعريف الانتشار :

يعرف الانتشار بأنه حركة الدقائق من منطقة ذات الطاقة الحركية العالية أي تركيز المادة عالي إلى منطقة ذات طاقة حركية منخفضة أي تركيز المادة منخفض بهدف الوصول للاتزان الطاقوي ويطلق على الطاقة المسببة للانتشار بالطاقة الحركية [5].

فالانتشار صفة من صفات المادة ناشئ عن الطاقة الحركية لدقائقها، وهو ينطبق على المادة المذابة في المحلول وعلى المذيب في أن واحد (بالنسبة للمحاليل)، حيث تنتشر المواد بصورة مستقلة عن بعضها البعض بفعل الطاقة الحركية لكل منها. فإذا وضعت عدة مواد في حيز واحد انتشرت جزيئات أي مادة منها انتشارا مستقلا عن جزيئات المواد الأخرى، بمعنى أن كل المواد تنتشر كما لو كانت المواد الأخرى غير موجودة. تنتشر جزيئات المادة المذابة انتشارا مستقلا عن جزيئات المذيب ويتوقف الاتجاه الذي تنتشر فيه جزيئات المادة المذابة على فرق تركيز المادة نفسها بغض النظر عن معدل أو اتجاه مادة مذابة أخرى في نفس المحلول، وإذا كانت المادة المذابة متأينة في المحلول كما هو الحال في المواد الإلكترونية فإن كل ايون ينتشر مستقلا عن الايون الأخر .

يحدث الانتشار في الغازات بسرعة أكبر منها في السوائل وذلك لان جزيئات الغازات أكثر تباعد وقل تصادم من جزيئات السوائل وهذه التصادمات هي التي تعيق الانتشار بين جزيئات السوائل أما في الأجسام الصلبة تكون سرعة الانتشار اقل من الغازات والسوائل لان جزيئاتها مرتبة في أنماط مترابطة وتحرك ببطء شديد [6] .



الشكل (1.1): ظاهرة الانتشار

إذا ما وضعت زجاجة تحتوي على سائل طيار مثل العطر او الكولونيا داخل غرفة فبعد وقت قصير يمكن ملاحظة هذه الرائحة المميزة في كل جوانب الغرفة.

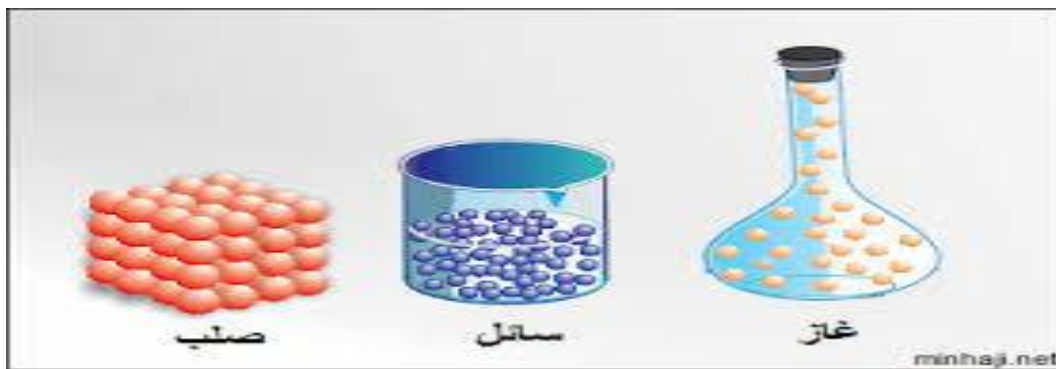
إذا وضعت بلورة من كبريتات النحاس في قاع كاس به ماء يلاحظ انتشار لون البلورة تدريجيا الى الأعلى الى ان يتم تجانس اللون في ماء الكأس.

3.1.2 حالات المادة :

المادة هي كل ماله كتلة وحجم ويشغل حيز في الفراغ تتواجد المواد في صورة صلبة وسائلة وغازية.

جدول 1.1: مقارنة بين خصائص حالات المادة [7]

الحالة / المميزات	غاز	سائل	صلب
الشكل والحجم	يتخذ شكل الاناء الذي يوضع فيه ولا يحتفظ بشكل محدد بل يملأه وعاء	يتخذ شكل أجزاء الاناء التي يملأها حجمه متميز بالثبات فهو يملأ كل الاناء	له شكل ثابت وحجم ثابت
الانضغاطية	قابل للانضغاط	قابليته للانضغاط صغيرة جدا	غير قابل للانضغاط
الانتشار	ينتشر بسرعة ودون حدود	ينتشر وقد لا يمتزج في سائل اخر ولكن ببطء	قد ينتشر صلب في اخر ببطء شديد
السرمان	يسري بدون عائق	يسري بدون عائق	لا يسري
الطاقة الحركية	طاقته الحركية عالية جدا	الطاقة الحركية لمكوناته (ذرات وجزيئات) عالية	طاقته الحركية ضعيفة



الشكل 1.2: حالات المادة

3.3.1 انتشار الغازات :

تنتشر الغازات المختلفة بمعدلات مختلفة حتى لو كانت تحت نفس الظروف البيئية ان معدل انتشار الغازات يتناسب عكسيا مع الجذر التربيعي لكثافتها النسبية بمعنى انه كلما زادت الكثافة النسبية للغاز كلما قل معدل انتشاره وكلما قلت الكثافة النسبية للغاز كلما زاد معدل الانتشار فالكثافة النسبية للغاز هو وزن حجم معين من الغاز بالنسبة لوزن نفس الحجم من الهيدروجين.

كما تزداد سرعة الانتشار بزيادة درجة الحرارة ويعزى ذلك إلى الزيادة بالطاقة الحركية للجزيئات كما أن الجزيئات تنتشر بصورة أبطى كلما كان الوسط الذي تنتشر فيه أكثر تركيز أي كلما كان تركيز وسط الانتشار أعلى كانت إعاقة حرية انتقال جزيئات الغاز أكبر وبالتالي معدل الانتشار اقل [6].

4.3.1 انتشار السوائل :

إن معدل انتشار المواد العضوية السائلة يعتمد بصورة أساسية على مدى قابليتها للذوبان في وسط الانتشار (الغشاء المائي الذي يفصل بينهما) فكلما كان معدل ذوبان المادة العضوية وامتزاجها بالماء عالي كلما كان معدل انتشارها كبير وكلما قل امتزاجها وقابليتها للذوبان في الماء كلما قل معدل الانتشار[6].

5.3.1 انتشار المواد الصلبة :

يعتمد معدل انتشار المواد الصلبة على قابليتها للامتصاص في الوسط الموجودة فيه فكلما كانت قابلية المادة للامتصاص في الوسط الموجود فيه (المذيب) كبيرة كان معدل انتشارها عالي والعكس صحيح كذلك يعتمد معدل الانتشار حجم وكتلة الدقيقة نفسها فكلما قلت كتلة الدقيقة وصغر حجمها كلما كان معدل انتشارها أسرع بينما يقل انتشار الدقيقة بزيادة كتلتها وحجومها [6].

6.3.1 قانونى فيك للانتشار :

عبارة عن قانونين يمثلان انتشار المواد عند غشاء نافذ وبحسبان تدفق الكتل عبر الغشاء كما يخصان الانتشار الذاتي لمادة في محلول او خليط ما. يسمى هذان القانونان باسم العالم الألماني ادولف فيك الذي اشتقهما عام 1855.

1.6.3.1 قانون فيك الأول:

يشكل القانون الأول لفيك المعادلة الأساسية لانتشار الجزيئات ينطبق على الغازات وكذلك السوائل والمواد الصلبة.

يربط هذا القانون بين تدفق مادة في وسط ما وحقل التركيز لهذه المادة، الفرضية الكامنة في هذا القانون هو ان التدفق يكون من المناطق ذات التركيز المرتفع في الحقل الى مناطق ذات التركيز المنخفض بمقدار يتناسب مع تدرج التراكيز في الحقل [8] [5].

ويعطى القانون العام لفيك بالعلاقة التالية:

في ثلاث ابعاد

$$\vec{j} = -D \vec{\nabla} C \quad (1-1)$$

حيث:

\vec{j} هو شعاع كثافة تدفق الانتشار بوحدة $\text{mol/m}^2 \cdot \text{s}$ وهو يقيس كمية المادة المتدفقة عبر مساحة صغيرة خلال وحدة من الزمن

D : هو معامل الانتشار او الانتشارية، بوحدة m^2/s وهو يتعلق بنوع المادة ويعبر عن المساحة التي تنتشر اليها مادة معينة خلال فترة زمنية

C : هو تركيز المادة بوحدة mol/m^3

$\vec{\nabla} C$: هو شعاع تدرج ثلاثي الابعاد لحقل التراكيز

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(D \vec{\nabla} C) \quad (2-1)$$

2.6.3.1 قانون فيك الثاني:

إذا ما استمرت عملية الانتشار فترة كافية او كانت سريعة تؤدي في النهاية الي تغيير حقل التراكيز، قانون فيك الثاني يصيغ تلك التغيرات التي تطرأ في حقل التركيز نتيجة عملية الانتشار. ويكتب قانون فيك الثاني العام (ثلاثي الابعاد) بالصيغة التالية في حالة عدم وجود مصدر ينتج أو يستهلك المادة [8]. [9].

أما إذا كان معامل الانتشار مستقل عن الزمن فيكون قانون فيك الثاني بالشكل التالي:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(D \bar{\nabla} C) \quad (3-1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = (D \nabla^2 C) \quad (4-1)$$

$$D = \text{cte}$$

4.1 معامل الانتشار

1.4.1 تعريف معامل الانتشار :

معامل الانتشار هو كمية مميزة لظاهرة انتشار المادة، يقيس معامل الانتشار النسبة بين التدفق الكتلي بسبب الانتشار الجزيئي وتدرج التركيز لأنواع الكيمائية ونرمز له بـ D ويقدر بـ [m²/s].

2.4.1 ترتيب سرعة الانتشار حسب حالة المادة :

يتم قياس سرعة ظاهرة الانتشار بواسطة معامل الانتشار، حيث يزيد معامل الانتشار عموماً مع درجة الحرارة، في حين أن انتشار الغاز مستقل ولكن يختلف مع الضغط، وانتشار السوائل والمواد الصلبة يعتمد بشكل أساسي على التركيز.

جدول 2.1: معامل الانتشار [m²/s] في أوساط مختلفة [9].

سرعة الانتشار [m ² /s]	المادة
10 ⁻⁴ - 10 ⁻⁶	الغاز (عند الضغط الجوي)
10 ⁻⁸ - 10 ⁻¹⁰	السائل
10 ⁻⁸ - 10 ⁻¹²	انتشار سائل في الصلب
10 ⁻¹⁰ - 10 ⁻¹⁴	الزجاج
10 ⁻¹⁰ - 10 ⁻³⁴	الصلب

جدول 3.1: معامل انتشار لبعض المواد

D [m ² /s]	T(K)	النظام
معاملات انتشار الغازات تحت الغلاف الجوي [10]		
12.85*10 ⁻⁵	273	H ₂ في H ₂
2.19*10 ⁻⁵	273	H ₂ O في الهواء
1.78*10 ⁻⁵	273	O ₂ في الهواء
معامل انتشار السوائل [10]		
1.9*10 ⁻⁹	298	NaCl في الماء
0.52*10 ⁻⁹	298	السكر في الماء
معامل انتشار المواد الصلبة [11]		
1.3*10 ⁻³⁰	298	Cu في Al
(2.4-5.5)*10 ⁻¹⁴	293	SiO ₂ في He
1.3*10 ⁻³⁰	298	Ni في H ₂

3.4.1 معامل الانتشار في الغازات :

يمكن تقدير معامل الانتشار لانتقال الغازات بالتحديد التجريبي غير عملي، إذ لا بد من استخدام العديد من الإجراءات التنبؤية، من خلال استخدام معادلات سهلة التطبيق تعطي تقديرات موثوقة يعطي الجدول 4 علاقات نظرية تقدر قيمة الانتشارية بوحدة [m²/s].

جدول 4.1: العلاقات لحساب معامل الانتشار في الخلائط الثنائية الغازية

الكاتب	المعادلات	الخطأ
خلائط ثنائية غير قطبية في ضغط مرتفع [3] [12]		
Chapman-Enskog	$D_{AB} = \frac{0.001858T^{3/2}M_{AB}^{1/2}}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D}$	7,3%
Fuller-schettler-Giddings	$D_{AB} = 1.43*10^{-7} \left(\frac{T^{1.75}}{M_{AB}^{1/2} \left[(\sum \nu)_A^{1/3} + (\sum \nu)_B^{1/3} \right]^2} \right)$	5,4%
Wilke-lee	$D_{AB} = \frac{(0.0027 - 0.0005M_{AB}^{1/2})T^{3/2}M_{AB}^{1/2}}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D}$	7,0%
خلائط ثنائية القطبية في ضغط منخفض [3] [12]		
Brokaw	$D_{AB} = \frac{(0.001858T^{3/2}M_{AB}^{1/2})}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D}$	9,0%
انتشار ذاتي في ضغط مرتفع [3] [13]		

Mathur-Thodos	$D_{AB} = \frac{(10,7 * 10^{-5} T_r)}{\beta \rho_r} [\rho_r \leq 1,5]$	5%
Lee-Thodos	$D_{AB} = \frac{(0,77 * 10^{-5} T_r)}{\delta \rho_r} \{ \rho_r \leq 1 \}$	0,5%
Lee-Thodos	$D_{AB} = \frac{(0,007094G + 0.001916)^{2,5} T_r}{\delta} \{ \rho_r \leq 1,5 \}$	17%
خلائط فوق الحرجة [3]		
sun and chen	$D_{AB} = \frac{1,23 * 10^{-10} T}{\mu^{0,799} V_{CA}^{0,49}}$	5%
Catchpole and king	$D_{AB} = 5.152 D_C T_r \frac{(\rho^{-0,667} - 0.4510)(1 + M_A / M_B) R}{(1 + (V_{CB} / V_{CA})^{0,333})^2}$	10%

جدول 5.1: العلاقات لحساب معامل الانتشار في الخلائط المتعددة المكونات [12]

الكاتب	المعادلات
Stefan-Maxwell , Smith and Taylor	$D_{im} = \left[1 - x_i \left(\sum_{j=1}^{NV} N_j \right) / N_i \right] / \left(\sum_{j=1}^{NC} x_j - \frac{x_i N_i}{N_i} \right) / D_{ij}$
Blanc	$D_{im} = \left(\sum_{j=1}^{NC} \frac{x_j}{D_{ij}} \right)^{-1}$
Wilke	$D_{im} = \left(\sum_{j \neq i}^{NC} \frac{x_j}{D_{ij}} \right)^{-1}$

4.4.1 4 معامل الانتشار للسوائل :

الانتشار في السوائل اقل بكثير مقارنة بالغازات وذلك راجع الى القرب الكبير بين جزيئات السائل على عكس جزيئات الغاز فان معامل الانتشار للمركب A في المركب B يختلف عن معامل الانتشار للمركب B في المركب A في الحالة العامة ويوجد حالات خاصة يكون متساوي.

هناك العديد من العلاقات المتاحة لحساب معامل الانتشار في السائل معظمها يقتصر على ثنائي

التخفيف اللانهائي D_{AB} او الانتشار الذاتي D_{AA} .

جدول 1. 6: علاقات معامل الانتشار في خليط ثنائي غير كهربائي [12] [13]

الكاتب	المعادلات	الخطأ
خلايط عامة [3]		
Wilke et chag	$D_{AB}^{\circ} = \frac{7.4 * 10^{-12} (\phi_B M_B)^{1/2} T}{\mu_B V_A^{0.6}}$	10%
Tayn-calus	$D_{AB}^{\circ} = \frac{8.93 * 10^{-8} (V_A / V_B^2)^{1/6} \psi_B / \psi_A T}{\mu_B}$	10%
Umesi-Danner	$D_{AB}^{\circ} = \frac{2.75 * 10^{-8} (R_B / R_A^{2/3}) T}{\mu_B}$	16%
Siddiqi-Lucas	$D_{AB}^{\circ} = \frac{9.89 * 10^{-8} V_B^{0.265} T}{\mu_B}$	
محلول مائي [3] [13]		
Hayduk-laucas	$D_{AW}^{\circ} = \frac{13.16 * 10^{-5}}{\mu_W^{1.14} V_A^{0.589}}$	18%
Siddiqi-Lucas	$D_{AW} = 2.98 * 10^{-7} V_A^{-0.5473} \mu_W^{-1.026} T$	
خلايط الهيدروكربونات [12]		
Hayduk-Minhas	$D_{AB}^{\circ} = 13.3 * 10^{-8} T^{1.47} V^{-0.71} \mu^{(10.2/V_A - 0.791)}$	5%
Matthews-Akgerman	$D_{AB}^{\circ} = 32.88 M_A^{-0.61} T^{0.5} V_A^{-1.04} (V_B - V_D)$	5%
Riazi-whitson	$D_{AB}^{\circ} = 1.07 \frac{(\rho D_{AB})^{\circ}}{\rho} \left(\frac{\mu}{\mu^{\circ}} \right)^{-0.27 - 0.38 \omega (-0.05 + 0.1 \omega) Pr}$	15%

جدول 1. 7: علاقات معامل الانتشار في محلول ثنائي مركز غير شاردي [12]

الكاتب	المعادلة
Caldwell-Ball	$D_{AB} = (x_A D_{BA}^{\circ} + x_B D_{AB}^{\circ}) \beta_A$
Rathbun-Babb	$D_{AB} = (x_A D_{BA}^{\circ} + x_B D_{AB}^{\circ}) \beta_A^n$
Vignes	$D_{AB} = (D_{BA}^{\circ x_B} D_{AB}^{\circ x_A}) \beta_A$
Leffler-Ullinan	$D_{AB} \mu_{mix} = (D_{AB}^{\circ} \mu_B)^{x_B} (D_{BA}^{\circ} \mu_A)^{x_A} \beta_A$
Cussler	$D_{AB} = D_0 \left[1 + \frac{K}{x_A x_B} \left(\frac{\partial \ln x_A}{\partial \ln a_1} - 1 \right) \right]^{-1/2}$
Cullinan	$D_{AB} = \frac{kT}{2\pi \mu_{mix} (V/A)^{1/3}} \left[\frac{2\pi x_A x_B}{1 + \beta_A (2\pi x_A x_B - 1)} \right]^{1/2}$

Asfour-Dullien	$D_{AB} = \left(\frac{D_{AB}^{\circ}}{\mu_B} \right)^{x_B} \left(\frac{D_{AB}^{\circ}}{\mu_A} \right) \zeta \mu \beta_A$
Siddiqi-Lucas	$D_{AB} = (C_{BB} D_{AB}^{\circ} + C_{AA} D_{BA}^{\circ}) \beta_A$

5. 4.1 معامل الانتشار للمواد الصلبة :

يحدد معامل الانتشار بالنسبة للمواد الصلبة اعتمادا على معادلة أرهينيوس التي تكتب بالشكل

التالي [25]:

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-E}{KT}\right) \quad (5-1)$$

T : درجة الحرارة بالكلفن

K : ثابت بولتزمان

ومن خلال بعض الدراسات السابقة حددت لنا بعض الصيغ الاخرى بمعامل الانتشار للمواد الصلبة

من بينها:

معامل انتشار الفسفور في السليسيوم [15]

تكتب العلاقة بالشكل التالي:

$$D_B^{eff} = h \left(D_h^0 + \bar{D} \left(\frac{n}{n_i} \right) \right) \quad (6-1)$$

$$D_i^{\circ} = 0.6e^{-3.482/kT}$$

$$\bar{D}_i = 0.324e^{-3.647/kT}$$

معامل انتشار البور في السليسيوم [15]

$$D_B^{eff} = h \left(D_h^{\circ} + D_v^{-} + \frac{P}{n_i} \right) \quad (7-1)$$

$$D_v^- = 0.76e^{-3.46/kT}$$

$$D_h^0 = 3.85e^{-3.66/kT}$$

معامل انتشار الفسفور في الجرمانيوم [15]

$$D_p^{eff} = h \left(D_v^- + \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \right) \quad (8-1)$$

$$D_v^- = 9.1e^{-2.85/kT}$$

6.4.1 العوامل المؤثرة على معامل الانتشار :

يتأثر معامل انتشار المواد المختلفة بالعوامل الآتية [16]:

1: حجم دقائق المادة المنتشرة

تناسب سرعة الانتشار تناسباً عكسياً مع حجم الأيونات أو الجزيئات المنتشرة بمعنى أنه كلما صغر حجم الأيون أو الجزيء المنتشر كلما زادت سرعة انتشاره

2: كتلة دقائق المادة

تناسب سرعة الانتشار تناسباً عكسياً مع الوزن الذري أو الجزيئي، لذلك إذا تساوت الدقائق في حجمها فإن الأثقل وزناً تكون هي الأبطأ في سرعة انتشارها

3: تركيز دقائق المادة المنتشرة

تنتقل الذرات أو الجزيئات من نقطة التركيز العالية لها إلى نقطة أخرى درجة التركيز عندها أقل بمعدل أسرع من العكس

4: درجة الحرارة والضغط

تزداد سرعة الانتشار بارتفاع درجة الحرارة أو الضغط بسبب زيادة الطاقة الحركية للجزيئات

5: قابلية المادة المنتشرة على الذوبان في وسط انتشار

تناسب سرعة الانتشار تناسباً طردياً مع سرعة ذوبان المادة المنتشرة، أي كلما كانت المادة أسرع بالذوبان كان انتشارها أسرع

5.1 النظرية الحركية للغازات :

إن النموذج الحركي للغاز تم استنتاجه من حقيقة أن الغاز يتكون من دقائق جزئية صغيرة تتحرك في جميع الاتجاهات بسرعة عالية جداً وتصطدم مع بعضها البعض ومع جدران الوعاء الذي يحتويها، إن الأساس الذي بنيت عليه النظرية الحركية للغازات المثالية بأن الغاز يتكون من عدد كبير من الجزيئات المتناهية في الصغر [7].

1.5.1 قوانين الغاز المثالي [18][17] :

1.1.5.1 قانون بويل:

إن حجم كمية معينة من غاز ما يتناسب عكسياً مع الضغط، إذا بقيت درجة الحرارة ثابتة

$$V \propto \frac{1}{P} \quad \text{أي} \quad P = \frac{k}{V} \quad (9-1)$$

2.1.5.1 قانون شارل وغي لوساك:

عند ضغط ثابت فإن الحجم المشغول بواسطة كتلة ثابتة من غاز يتناسب طردياً مع درجة الحرارة المطلقة

$$V \propto T \quad \text{أي} \quad V = kT \quad (10-1)$$

قانون شارل

عند ثبات كمية من غاز فإن ضغطه يتناسب طردياً مع درجة حرارته المطلقة

$$P \propto T \quad \text{أي} \quad P = kT \quad (11-1)$$

3.1.5.1 فرضية وقانون أفوجادرو:

يصاغ قانون أفوجادرو على النحو التالي: يتناسب حجم عينة من غاز كامل طرداً مع عدد مولاته في درجة حرارة وضغط ثابتين

$$P \propto n \quad P = kn \quad (12-1)$$

5.1.1 قانون الغاز المثالي:

على اعتبار أن ضغط عينة من غاز مثالي يتناسب عكس مع حجم هذه العينة عند درجة حرارة ثابتة (قانون بويل) وطرذا مع درجة حرارتها فادا كان حجمها ثابتا (قانون شارل) وطرذا مع عدد مولاتها اذا كان كل من ضغطها ودرجة حرارتها ثابتين (قانون أفوجادرو) أي أن:

$$P \propto \left(\frac{nT}{V} \right) \quad \text{اي} \quad PV = nRT \quad (13-1)$$

$$n = \frac{N}{N_0} \quad \text{حيث ان}$$

$$PV = NK_B T \quad (14-1)$$

R : ثابت الغازات المثالية

V : حجم العينة للغاز الكامل

T : تمثل درجة حرارة عينة الغاز

P : الضغط الذي تخضع اليه العينة

K_B : ثابت بولتزمان

N_0 : عدد أفوجادرو

n : عدد المولات

يمكن حساب قيمة ثابت الغازات المثالية انطلاقا من الشروط القياسية

$$R = (1 \text{ atm}) * 22.4 \text{ l} / (1 \text{ mol}) * 273.15 \text{ (k)} = 0.082 \text{ atm} * \text{l} / \text{mol} * \text{k}$$

$$R = 8.31 * 10^7 \text{ erg} / \text{mol} * \text{k}$$

$$R = 8.31 \text{ j} / \text{mol} * \text{k}$$

$$R = 1.99 \text{ cal} / \text{mol} * \text{k}$$

2.5.1. الضغط في الغاز [19] [7] :

الضغط عامة هو القوة المؤثرة على وحدة المساحة من سطح ما

$$P = \frac{F}{S} [N / m^2] \quad (15-1)$$

أما ضغط الغاز فهو القوة المبذولة من قبل الغاز على جدران الوعاء مقسوما على مساحة سطح الوعاء

نفرض وجود غاز في اناء مكعب الشكل حجمه V به N جزيئات وسرعة كل جزيئة هي v يحدث تصادم بين الجزيئات في الوعاء وانعكاسها ينتج عنه تغير في زخم وطبقا لقانون نيوتن الثاني فان معدل تغير الزخم لكل وحدة مساحة هو القوة التي يسلطها الغاز على وحدة المساحة وتساوي ضغط

$$P = \frac{1}{3} \cdot m \cdot \frac{N}{V} \cdot v^2 \quad (16-1)$$

m كتلة الجزيء الواحد

N/V تمثل عدد الجزيئات في وحدة الحجم

v^2 تمثل متوسط مربع سرعة الجزيئات

نستنتج ان الضغط يتناسب طرديا مع عدد الجزيئات لكل وحدة حجوم ويتناسب طرديا مع طاقة حركة الجزيئات

$$PV = \frac{1}{3} m N v^2 \quad (17-1)$$

$$PV = \frac{2}{3} N \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle \quad (18-1)$$

$\left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle$: تمثل متوسط الطاقة الحركية للجزيء الواحد

3.5.1 درجة حرارة الغاز :

درجة الحرارة هي صفة فيزيائية تعبر عن مقياس سخونة والبرودة للمادة، حيث انها تحدد اتجاه انتقال الحرارة بين جسمين، وتنقل هذه الحرارة من منطقة درجة حرارة عالية الى منطقة ذات درجة حرارة منخفضة وذلك ناتج عن سريان الطاقة الحرارية [7].

من المعادلة (18-1) ومعادلة (14-1) بالمساوات بين العلاقتين

$$T = \frac{2}{3} K_B \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle \quad (19-1)$$

$$\left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle = \frac{3}{2} K_B T \quad (20-1)$$

نستنتج ان درجة الحرارة هي مقياس لمتوسط طاقة حركة الجزيئات

4.5.1 توزيع ماكسويل-بولتزمان للسرع :

حسب قانون ماكسويل _ بولتزمان الذي يدرس العلاقة بين جزيئات الغاز والسرعة التي تتحرك بها الجزيئات، استطاع التوصل إلى عدة علاقات لحساب ثلاث أنواع من السرع وهي كالتالي [20]:

1.4.5.1 السرعة الأكثر احتمالاً: تتناسب طردياً مع درجة حرارة الغاز وعكسياً مع الوزن الجزيئي

للغاز وهي كالشكل التالي:

$$v_{mp} = \sqrt{\frac{2KT}{m}} = \sqrt{\frac{2RT}{M}} \quad (21-1)$$

2.4.5.1 السرعة المتوسطة: وهي بالشكل التالي:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8KT}{\pi m}} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \quad (22-1)$$

3.4.5.1 الجذر التربيعي لمتوسط مربع السرعة الجزيئية: مقارنة مع السرع السابقة فان هذه السرعة

أصغر من السرعة المتوسطة والسرعة المتوسطة أكبر من السرعة الأكثر احتمالاً وهي كالتالي

$$v_{ms} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} = \sqrt{\frac{3K_B T}{m}} \quad (23-1)$$

M الكتلة المولية

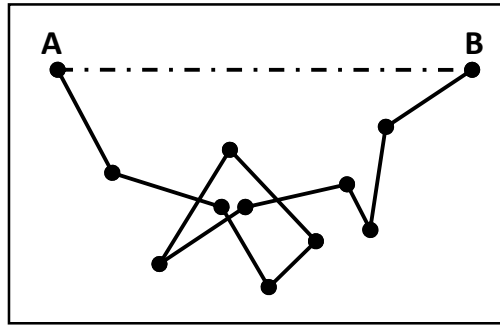
R ثابت الغازات المثالية

T درجة الحرارة

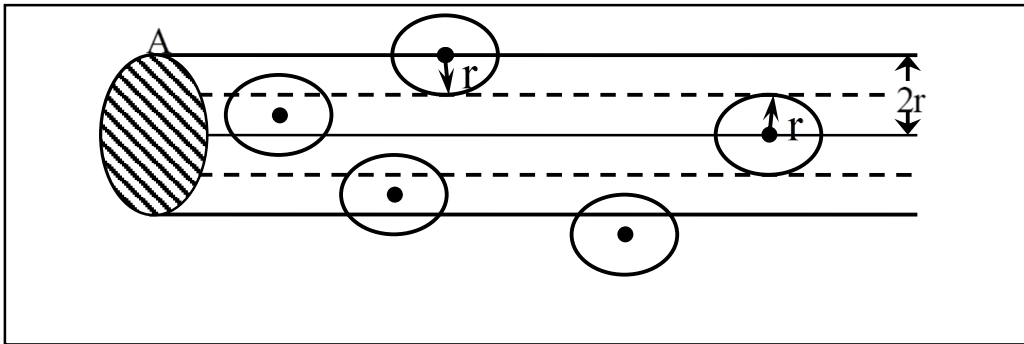
m الكتلة

5. 5.1 متوسط المسار الحر لجزيئات الغاز :

المسار الحر هو المسافة التي يقطعها الجزيء بين تصادمين متتاليين. بما أن عدد الجزيئات هائل في الغاز إذن يستحيل الكلام عن المسار الحر لكل منها ولكن ما يمكننا معرفته هو متوسط المسار الحر [21].



الشكل (3.1): مسار جزيء يتعرض للتصادم



الشكل (4.1): اسطوانة

مساحة الأسطوانة تساوي $A = \pi(2r)^2 = \pi d^2$

حجم الأسطوانة هو $V = Avt$

A: مساحة الأسطوانة

vt : المسافة التي يقطعها الجزيء

$2r$: نصف قطر الأسطوانة

d : قطر الاسطوانة

عدد التصادمات التي تقابل الجزيء في وحدة الزمن هو $Z=n*V=n*A *vt$

ولكن عدد جزيئات الغاز تتحرك وليس واحدا منها فقط ولذلك فان السرعة في العلاقة السابقة يجب

استبدالها بالسرعة النسبية للجزيء والتي أثبت ماكسويل بانها تساوي $v_{rel}=\sqrt{2} *v$

ادن متوسط عدد الجزيئات في الزمن t هو $Z=n.Avt \sqrt{2}$

خلال الزمن t يقطع الجزيء خط منكسر طوله AB يحتوي على عدد من التصادمات Z وعليه يكتب متوسط المسار الحر بالشكل:

$$\lambda = \frac{vt}{z} = \frac{vt}{nAvt \sqrt{2}} = \frac{1}{nA \sqrt{2}} \quad (24-1)$$

5.1.6 قوة VanderWaals:

تتولد هذه القوة بين الذرات أو الجزيئات بشكل عام، وهي تظهر فقط عندما لا توجد قوى ربط

أخرى أعظم قيمة منها فتطغى عليها، وتنشأ هذه القوى بين الذرات المتعادلة أو الجزيئات مثل ذرات

الغازات الخاملة (Kr، Ar، Ne) أو الجزيئات (O₂، N₂، H₂، CO، CH₄). [22]

1.6.5.1 كمون ديبياي (Debye): تنشأ بين ثنائي قطب محرض وثنائي قطب دائم وتبلغ طاقتها

من 1-3 كيلو كالوري /مول وتزداد قوتها بازدياد عزم ثنائي القطب وتصاغ طاقتها بالشكل التالي:

$$E_D = \frac{1}{r^6} \left[\frac{\alpha_1 \mu_2^2 + \alpha_2 \mu_1^2}{(4\pi \epsilon_0 \epsilon_r)} \right] \quad (25-1)$$

2.6.5.1 كمون لندن (London): تنشأ بين ثنائي قطب محرض وثنائي قطب محرض اخر وتبلغ

طاقتها 0,5-1 كيلو كالوري /مول وتزداد قوة هذه الروابط بازدياد الوزن الجزيئي.

$$E_L = \frac{1}{r^6} \left[\frac{3h}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(4\pi \epsilon_0 \epsilon_r)^2} \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2} \right] \quad (26-1)$$

3.6.5.1 كمون كه سوم (Keesom):

تنشأ بين ثنائيات الأقطاب الدائمة في الجزيئات القطبية وتبلغ طاقتها 1-7 كيلو كالوري / مول وتزداد بازدياد عزم ثنائي القطب.

$$E_K = \frac{1}{r^6} \left[\frac{2\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)K_B T} \right] \quad (27-1)$$

ومنه كمون VanderWaals تكتب بالشكل:

$$E_{VanderWaals} = \frac{1}{r^6} \left[\frac{2\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)K_B T} \right] + \left[\frac{\alpha_1 \mu_2^2 + \alpha_2 \mu_1^2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)} \right] + \left[\frac{3h}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2} \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2} \right] \quad (28-1)$$

وتشتق عبارة القوة من عبارة الكمون فتكتب من الشكل

$$F_{VanderWaals} = 6 \left[\frac{r}{\|\vec{r}\|} \right]^{-7} \left[\left[\frac{2\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)K_B T} \right] + \left[\frac{\alpha_1 \mu_2^2 + \alpha_2 \mu_1^2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)} \right] + \left[\frac{3h}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2} \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2} \right] \right] \quad (29-1)$$

6.1 : المحاكاة العددية

1.6.1 مفهوم المحاكاة :

اللغة: هي التقليد [23].

اصطلاحاً: هناك عدة تعاريف يمكن تلخيصها على النحو التالي:

المحاكاة العددية هي عبارة عن محاولة إيجاد صورة طبق الأصل من نظام أو نشاط دون أن نحاول الحصول على النظام الحقيقي نفسه أو يمكن القول انه أسلوب رياضي يستلزم تنفيذه على الحاسب الالكتروني لمعالجة المشاكل التي تتداخل فيها أنواع معينة من العلاقات الرياضية والمنطقية الضرورية لوصف سلوك أو هيئة نظام لعالم حقيقي معقد ولفترات زمنية طويلة [23].

2.6.1 طرق المحاكاة :

تشمل المحاكاة طريقتان رئيسيتان هما طريقة مونتى كارلو وطريقة الديناميكا الجزيئية وسنتناول هاتين الطريقتين بالشرح كالآتي:[24]

1.2.6.1 طريقة مونتى كارلو :

طريقة مونتى كارلو هي طريقة لحل المشاكل المختلفة في الرياضيات الحسابية عن طريق بناء عملية عشوائية لكل مشكلة تكون لها متغيرات تساوي الكميات المطلوبة في المشكلة. ويتم تحديد المجاهيل تقريبا عن طريق عمل ملاحظات على العملية العشوائية وحساب الخصائص الإحصائية والتي تتساوى تقريبا مع المتغيرات المطلوبة.

2.2.6.1 طريقة الديناميكا الجزيئية :

الديناميكا الجزيئية عبارة عن شكل من أشكال محاكاة الحاسوب حيث يسمح للذرات والجزيئات بالتفاعل لفترة زمنية في ظل قوانين الفيزياء ويتم تتبع التطور مع الزمن لمجموعة من الذرات المتفاعلة ومن ثم نكامل معادلات الحركة وتبنى طريقة محاكاة الديناميكا الجزيئية على القانون الثاني لنيوتن أو معادلة الحركة.

3.6.1 خوارزمية فيرلي :

طريقة التحريك الجزيئي تعتمد على نتائج معادلات الحركة وتعتمد على نمط الوصف، تستعمل خوارزمية فيرلي في لحظة وموضع وتسارع لجزيء ما نستطيع معرفته بمكاملة معادلات نيوتن من اللحظة $t - \Delta t$ الى اللحظة $t + \Delta t$.

لدينا نوعين من خوارزمية فيرلي

1.3.6.1 خوارزمية فيرلي بخطوتين تكتب بالعلاقة التالية:

خطوات خوارزمية فيرلي بخطوتين [25]

$$\left. \begin{aligned} x_{n+1} &= x_{n+1} + (\delta t)(v_{n+3/2}) \\ &= x_{n+1} + \delta t(v_{n+1/2}) + \delta t(a_{n+1}) \\ &= x_{n+1} + \delta t(v_{n+1/2}) + (\delta t)^2(a_{n+1}) \\ &= x_{n+1} + (x_{n+1} - x_n) + (\delta t)^2 a_{n+1} \end{aligned} \right\} \quad (30-1)$$

من خلال جمع هاتين المعادلتين تختفي السرعة

$$\dot{r}(t + \delta t) = \dot{r}(t) + \delta t \dot{v}(t) + \frac{\delta t^2}{2} \dot{a}(\dot{r}(t)) \quad (31-1)$$

$$\dot{r}(t + \delta t) = \dot{r}(t) - \delta t \dot{v}(t) + \frac{\delta t^2}{2} \dot{a}(\dot{r}(t)) \quad (32-1)$$

ونحصل على المعادلة التالية:

$$\bar{r}_{n+1} = 2\bar{r}_n - \bar{r}_{n-1} + \bar{a}_n \Delta t^2 \quad (33-1)$$

2.3.6.1 خوارزمية فيرلي بخطوة واحدة تكتب بالعلاقة التالية:

خطوات خوارزمية فيرلي بخطوة واحدة [26]

1- تحديد خطوة الزمن

2- تحديد الشروط الاولية $t=t_0$

$$\vec{v} = v_0, \vec{r} = r_0$$

3- حساب التسارع

$$\bar{a}(\bar{r})$$

4- إذا كان

$$t < T$$

- حساب

$$\bar{a}_0 = \bar{a}(\bar{r})$$

- حساب المواضع الجديدة

$$\bar{r} = \bar{r} + \delta t(\bar{v}) + \frac{\delta t}{2} \bar{a}_0$$

- حساب التسارع الجديد

$$\bar{a}_1 = \bar{a}(\bar{r})$$

- حساب السرعة الجديدة

$$\bar{v} = \bar{v} + \frac{\delta t}{2} (\bar{a}_0 + \bar{a}_1)$$

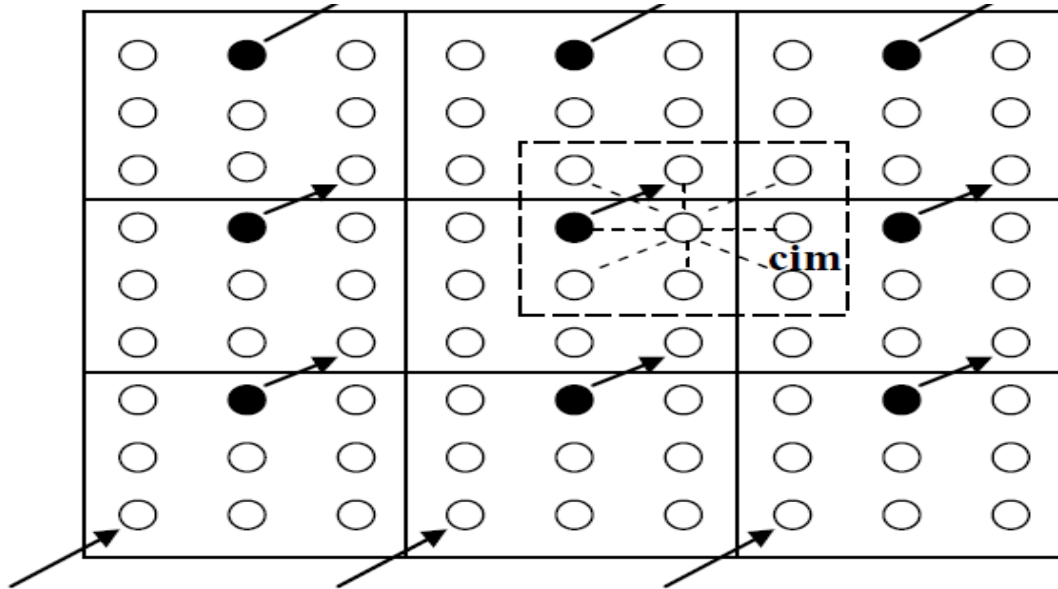
$$t = t + \delta t$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{r}_{n+1} = 2\bar{r}_n + \bar{v}_n \Delta t + \bar{a} \frac{\Delta t^2}{2} \\ \bar{v}_{n+1} = \bar{v}_n + \frac{\Delta t}{2} (\bar{a}_n + \bar{a}_{n+1}) \end{array} \right. \quad (34-1)$$

$$(35-1)$$

4.6.1 الشروط الحدودية :

عند الدراسة يجب اخذ بعين الاعتبار تأثير الذرات المتواجدة في حدود خلية المحاكاة حيث اختيرت خلية واحدة في جميع انحاء الفضاء، لهذا نستخدم الشروط الحدودية لإرجاع الذرات الخارجة من خلية المحاكاة او إيجاد صورة لها [27] .



الشكل (5.1): الشروط الحدودية في ثلاث ابعاد

الفصل الثاني:
المحاكاة بالديناميكا الجزيئية

الفصل الثانيالمحاكاة بالديناميكا الجزيئيةمقدمة:

المحاكاة هي أحد الوسائل المهمة لحل المشاكل، وهي الوسيلة الوحيدة والأخيرة لحل أي مشكلة إذا ما استعصى حلها بالطرق التحليلية أو العددية وتعتمد المحاكاة على طرق إعادة المعاينة وتوليد أرقام ومتغيرات عشوائية لها صفات معينة.

الفرضيات: نفترض ان:

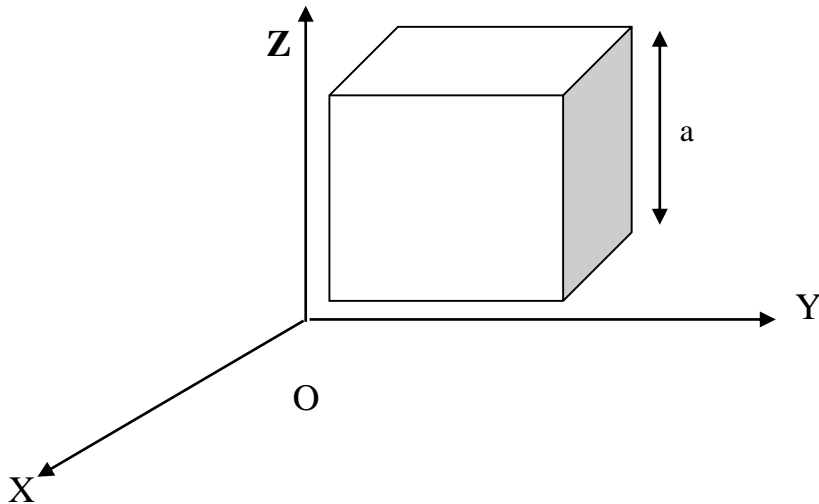
الغاز مثالي.

كمية المادة في خلية المحاكاة تخضع لقانون الغاز المثالي.

انتقال الجزيئات يكون بخطوات صغيرة جدا هي أجزاء من متوسط المسار الحر لذلك فالتصادمات بين الجزيئات مهمة.

1.2 الوصف الفيزيائي لخلية المحاكاة:

تتموضع جزيئات الغاز بشكل عشوائي في الخلية، في دراستنا نطبق المحاكاة على غاز الهيدروجين اخترنا خلية مكعبة الشكل طول ضلعها a . تتكون من 245 جزيء هيدروجين



الشكل (1.2) خلية المحاكاة

2.2 الوصف الفيزيائي للظاهرة:

تعتبر ظاهرة الانتشار عملية تلقائية في السوائل والغازات والمواد الصلبة عند درجة حرارة T وضغط P، حيث متوسط الطاقة الحركية للجزيء

$$E_c = \frac{1}{2} mv^2 \quad (1-2)$$

وبفعل هذه الطاقة تنتشر جزيئات المادة بمواقع عشوائية

3.2 طاقة التفاعل بين اي ذرتين او جسيمين او جزيئتين او شارديتين مفصولتين i و k

بمسافة r_{ki} :

تعطى بكمون فاند فالس المعرف بالعبارة التالية: [28]

$$F_{vandervals} = 6 \left[\frac{r}{\|r\|} \right]^{-7} \left[\left[\frac{2\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)K_B T} \right] + \left[\frac{\alpha_1 \mu_2^2 + \alpha_2 \mu_1^2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)} \right] + \left[\frac{3h}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2} \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2} \right] \right] \quad (2-2)$$

$$K_K = \left[\frac{2\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)K_B T} \right] \quad (3-2)$$

$$K_D = \left[\frac{\alpha_1 \mu_2^2 + \alpha_2 \mu_1^2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)} \right] \quad (4-2)$$

$$K_L = \left[\frac{3h}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2} \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2} \right] \quad (5-2)$$

حيث

α : تمثل الاستقطابية بوحدة [cm³]

μ : تمثل عزم ثنائي الأقطاب بوحدة [D]

ϵ_0 : ثابت نفاذية الفراغ

ϵ_r : ثابت النفاذية في الفراغ ويساوي 1

ν : تمثل ترددات امتصاص الكهرباء بوحدة [HZ]

K_B : ثابت بولتزمان بوحدة [J/K]

T: درجة الحرارة بوحدة [K]

h : ثابت بلانك [J.S]

r (i,j) المسافة بين ذرتين و تحسب بالعلاقة التالية :

$$r_{ik} = \|\vec{r}_k - \vec{r}_i\|, \vec{r}(i,k) = \vec{r}_k - \vec{r}_i$$

4.2 القوة التي تطبقها الذرة K على الذرة i:

بعد اشتقاق عبارة الكمون نحصل على عبارة القوة: [22] [28]

$$\vec{F} = -\frac{\partial E}{\partial r} \vec{e}_r \quad (6-2)$$

بعد التحويل من الاحداثيات الاسطوانية الى الديكارتية نحصل على:

$$\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{\|\vec{r}\|} = \frac{x}{\|\vec{r}\|} i + \frac{y}{\|\vec{r}\|} j + \frac{z}{\|\vec{r}\|} k \quad (7-2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} F_x = 6 \left[\frac{x}{\|\vec{r}\|} \right]^{-7} [K_D + K_L + K_K] \quad (8-2) \\ F_y = 6 \left[\frac{y}{\|\vec{r}\|} \right]^{-7} [K_D + K_L + K_K] \quad (9-2) \\ F_z = 6 \left[\frac{z}{\|\vec{r}\|} \right]^{-7} [K_D + K_L + K_K] \quad (10-2) \end{array} \right.$$

$$F_{VanderWals} = 6 \left[\frac{r}{\|\vec{r}\|} \right]^{-7} \left[\left[\frac{2\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)K_B T} \right] + \left[\frac{\alpha_1 \mu_2^2 + \alpha_2 \mu_1^2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)} \right] + \left[\frac{3h}{2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2} \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2} \right] \right] \quad (11-2)$$

5.2 النموذج الرياضي:

1.5.2 معادلات الحركة :

معادلات الحركة لجسيم احداثياته $r_i(t)$ وتسارعه a_i وكتلته m تكون بالشكل [29] :

$$\vec{F} = m_i \vec{a}_i = m_i \frac{\partial^2 \vec{r}_i(t)}{\partial t^2} \quad (12-2)$$

$$a_i(t) = \frac{F_i(t)}{m_i} \quad (13-2)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i(t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 z}{\partial t^2} \quad (14-2)$$

حيث:

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = a_{k,i} = \frac{1}{m} \sum_{i \neq k} F_{ki} \frac{x_i - x_k}{r_{ki}} \quad (15-2)$$

$$\frac{d^2 y_i}{dt^2} = a_{k,i} = \frac{1}{m} \sum_{i \neq k} F_{ki} \frac{y_i - y_k}{r_{ki}} \quad (16-2)$$

$$\frac{d^2 z_i}{dt^2} = a_{k,i} = \frac{1}{m} \sum_{i \neq k} F_{ki} \frac{z_i - z_k}{r_{ki}} \quad (17-2)$$

2.5.2 معادلات خوارزمية فيرلي :

اختيار الخوارزمية مهم لحل معادلة الحركة لان دقة النتائج او سرعة الحسابات ترتبط بالخوارزمية.

في دراستنا اخترنا خوارزمية فيرلي بخطوتين تعطى بالمعادلات التالية: [26]

$$x_{i,n} = 2x_{i,n-1} - x_{i,n-2} + (\Delta t)^2 a_{x,n} \quad (18-2)$$

$$y_{i,n} = 2y_{i,n-1} - y_{i,n-2} + (\Delta t)^2 a_{y,n} \quad (19-2)$$

$$z_{i,n} = 2z_{i,n-1} - z_{i,n-2} + (\Delta t)^2 a_{z,n} \quad (20-2)$$

$$\vec{r}_{i,n} = 2\vec{r}_{i,n-1} - \vec{r}_{i,n-2} + (\Delta t)^2 \vec{a}_{r,n} \quad (21-2)$$

3.5.2 المواضع والسرعات الابتدائية:

1.3.5.2 المواضع الابتدائية:

قمنا بإعطاء مواضع ابتدائية للجزيئات. لكل جزيء ثلاث مركبات

2.3.5.2 السرعات الابتدائية:

قمنا بإعطاء سرعات عشوائية لكل جزيء من جزيئات الخلية وفق توزيع ماكسويل بولتزمان

4.5.2 الشروط الحدية الدورية : من أجل التقليل من اثر الحواف نستعمل الشروط الحدية الدورية

حيث

$$\left\{ \begin{array}{l} (x_i \succ \frac{a}{2}) \rightarrow x_i = x_i - a, x(1, i) \succ x(1, j) \\ (x_i \prec \frac{a}{2}) \rightarrow x_i = x_i + a, x(1, j) \succ x(1, i) \end{array} \right.$$

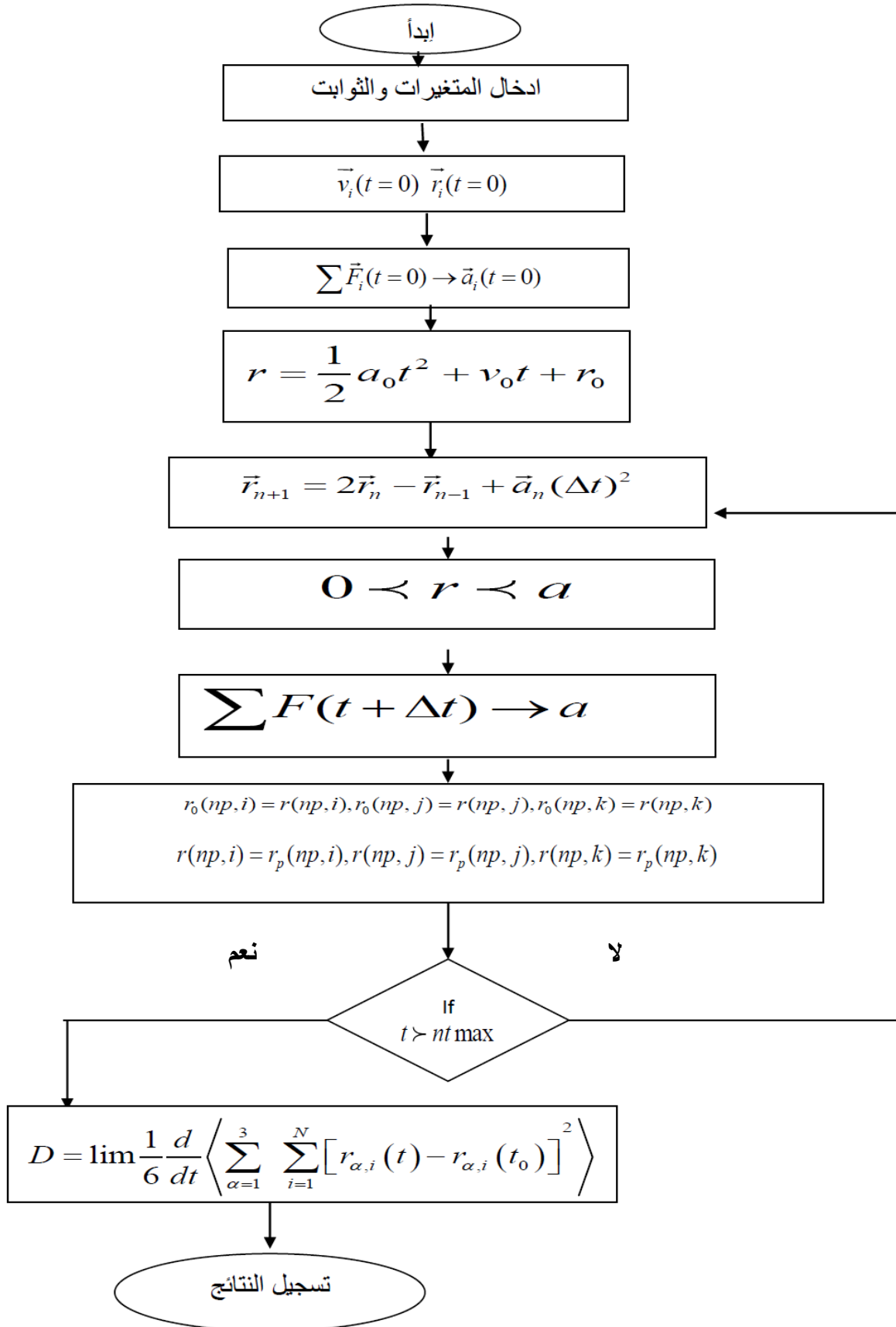
$$\left\{ \begin{array}{l} (y_i \succ \frac{a}{2}) \rightarrow y_i = y_i + a, y(1, j) \succ y(1, i) \\ (z_i \succ \frac{a}{2}) \rightarrow z_i = z_i + a, z(1, j) \succ z(1, i) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} (z_i \succ \frac{a}{2}) \rightarrow z_i = z_i - a, y(1, i) \succ y(1, j) \\ (z_i \prec \frac{a}{2}) \rightarrow z_i = z_i + a, z(1, j) \succ z(1, i) \end{array} \right.$$


عند الدراسة يجب اخذ بعين الاعتبار تأثير الذرات المتواجدة في حدود خلية المحاكاة حيث اختيرت

خلية واحدة في جميع انحاء الفضاء

6.2 مخطط تصميم البرنامج :



الشكل (2.2) مخطط الخوارزمية



الفصل الثالث:
عرض النتائج ومناقشتها

الفصل الثالث:

عرض النتائج و مناقشتها

المقدمة:

في هذه الدراسة نقوم بمحاكاة ظاهرة الانتشار لجزيئات غاز وحساب معامل الانتشار لبعض الغازات باستعمال طريقة الديناميكا الجزيئية. ندرس تغير المواضع جزيئات الغاز مع الزمن، ثم ندرس تأثير درجة الحرارة والضغط على معامل الانتشار، انجزنا المحاكاة بلغة الفور ترون

1.3 الانتشار الذاتي لغاز الهيدروجين :

الصيغة النظرية لفولر [9].

$$D_{AB} = \frac{10^{-3} T^{1.75} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2}}{P \left[\left(\sum_i V_{iB} \right)^{1/3} + \left(\sum_i V_{iA} \right)^{1/3} \right]^2} \quad (1-3)$$

الصيغة المستعملة في المحاكاة لحساب معامل الانتشار [30].

$$D = \lim \frac{1}{6} \frac{d}{dt} \left\langle \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{i=1}^N [r_{\alpha,i}(t) - r_{\alpha,i}(t_0)]^2 \right\rangle \quad (2-3)$$

الجدول 1.3: قيم بعض المقادير المستعملة في المحاكاة بانتشار الهيدروجين في الهيدروجين

vol [m ³]	1.153766 *10 ⁻²¹
Vcel[m ³]	9.230130 *10 ⁻²⁴
λ[m]	6.791889 *10 ⁻²⁹
a[m]	2.097663 *10 ⁻⁸
V _{moy} [m/s]	1700.17

الجدول 3. 2: المقارنة بين نتائج القيم النظرية والمحسوبة لمعامل الانتشار الذاتي

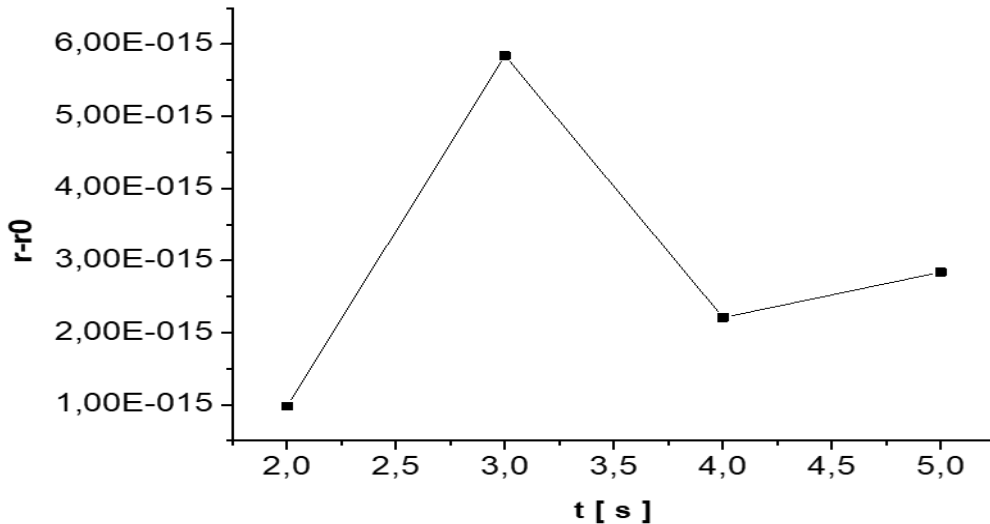
	القيم المحسوبة لمعامل الانتشار	القيم النظرية لمعامل الانتشار
H ₂ _H ₂	D = 6.5407*10 ⁻⁵ [m ² /s] T=273 [k] P=1*10 ⁵ [Pa]	D =12.85*10 ⁻⁵ [m ² /s] [10] T=273 [k] P=1*10 ⁵ [Pa]
H ₂ _O ₂	D = 3.305 *10 ⁻⁵ [m ² /s] T=316 [k] P=1*10 ⁵ [Pa]	D =8.91 *10 ⁻⁵ [m ² /s] [9] T =316 [k] P=1*10 ⁵ [Pa]

من الجدول 3. 2 نلاحظ ان قيم معامل الانتشار المتحصل عليها من البرنامج قريبة من القيم النظرية في نفس الشروط من درجة حرارة وضغط ويرجع الفرق في الاختلاف الصغير الى الارتياب في أخطاء الحساب

3. 1. 1 منحنيات خاصة بالانتشار الذاتي للهيدروجين مع الملاحظات :

3. 1. 2 مواضع الجزيئات:

من خلال البرنامج قمنا بإيجاد الفرق بين المواضع الابتدائية والمواضع الانتقالية لجزيئات الغاز خلية المحاكاة كما هي مبينة في الشكل:

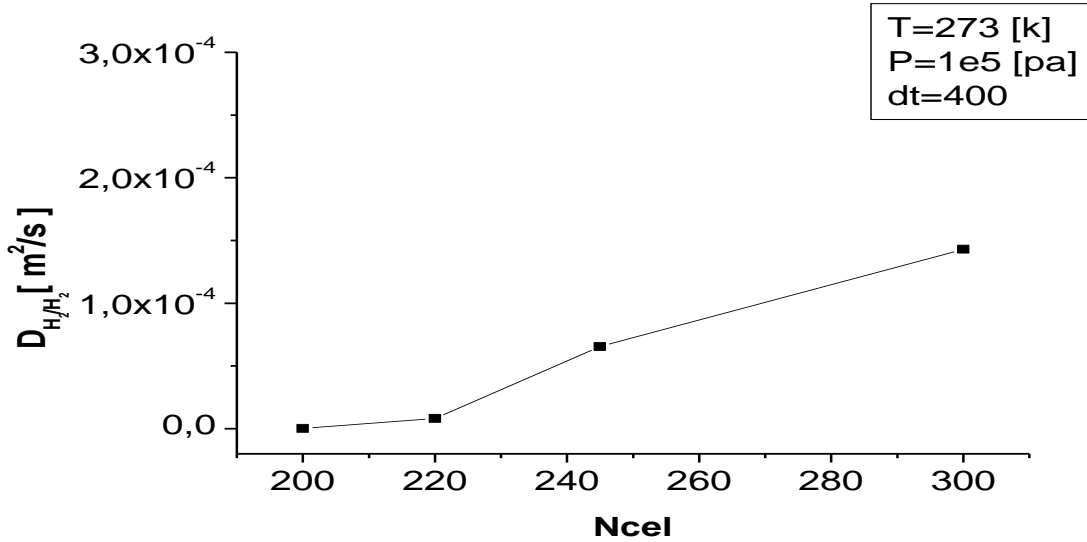


الشكل (3. 1) تغيرات الفرق بين المواضع الابتدائية والانتقالية بدلالة الزمن

من المنحنى نلاحظ ان الفرق بين المواضع الابتدائية والانتقالية يتزايد ويتناقص مع زيادة الزمن وهذا ما يؤكد الحركة العشوائية لجزيئات الغاز وذلك نتيجة حركتها بسرور عالية وتصادمها مع جدران الوعاء الذي يحتويها

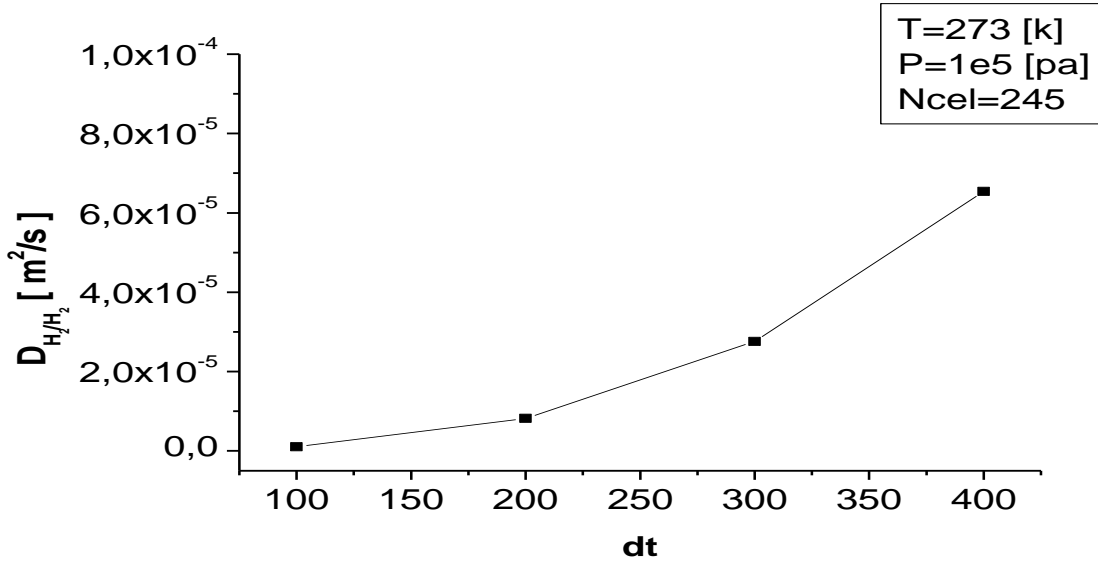
جدول 3.3: تغيرات حجم الخلية وكمية المادة بدلالة عدد الجزيئات

Ncel	Vcel (m ³)	n (mole)
200	7.53*10 ⁻²⁴	3.3213*10 ⁻²²
220	8.28*10 ⁻²⁴	3.6543*10 ⁻²²
245	9.23*10 ⁻²⁴	4.06*10 ⁻²²
280	1.05*10 ⁻²³	4.6498*10 ⁻²²
300	1.13*10 ⁻²³	4.9819*10 ⁻²²



الشكل (2.3): تغيرات معامل الانتشار بدلالة عدد جزيئات الخلية

من خلال الشكل 2.3 نجد ان كلما زاد عدد جزيئات الخلية زاد معدل الانتشار وفي الحقيقة الزيادات صغيرة جدا حيث تكون شبه مهملة فمن المفروض ان تبقى ثابتة في نفس الظروف الضغط ودرجة الحرارة مع العلم ان حجم الخلية وكمية المادة غير ثابتة من خلال النتائج المتحصل عليها من البرنامج في الجدول 3.3

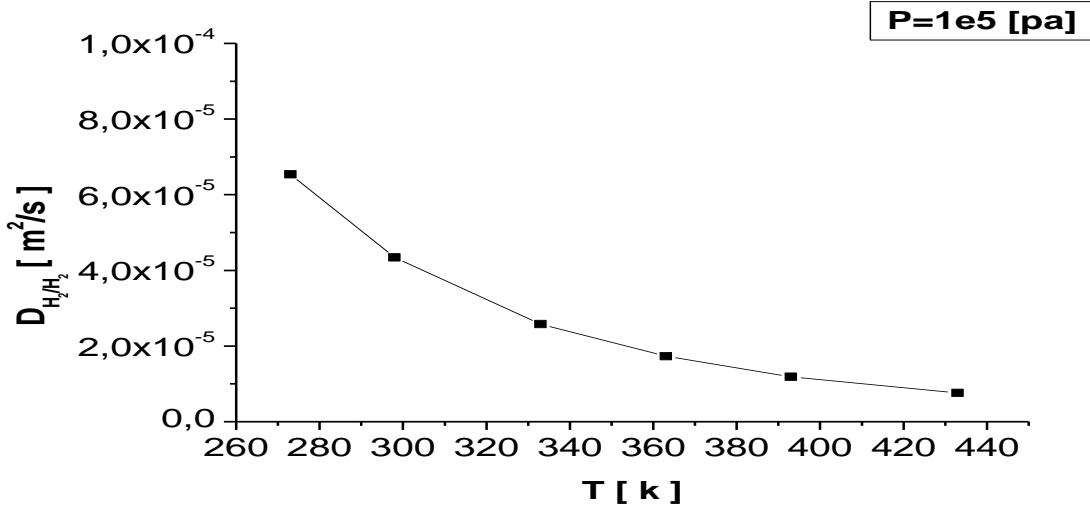


الشكل (3.3): تغيرات معامل الانتشار بدلالة زمن المحاكاة

التعليق: كلما زاد زمن المحاكاة زاد معدل الانتشار بكميات صغيرة حيث تكون شبه ثابتة.

جدول 4.3: تغيرات حجم الخلية وكمية المادة بدلالة درجة الحرارة

T [K]	Vcel (m ³)	n (mole)
273	9.23*10 ⁻²⁴	4.06*10 ⁻²²
273+25	1.0075*10 ⁻²³	4.06*10 ⁻²²
273+50	1.09*10 ⁻²³	4.06*10 ⁻²²
273+90	1.22*10 ⁻²³	4.06*10 ⁻²²
273+100	1.26*10 ⁻²³	4.06*10 ⁻²²

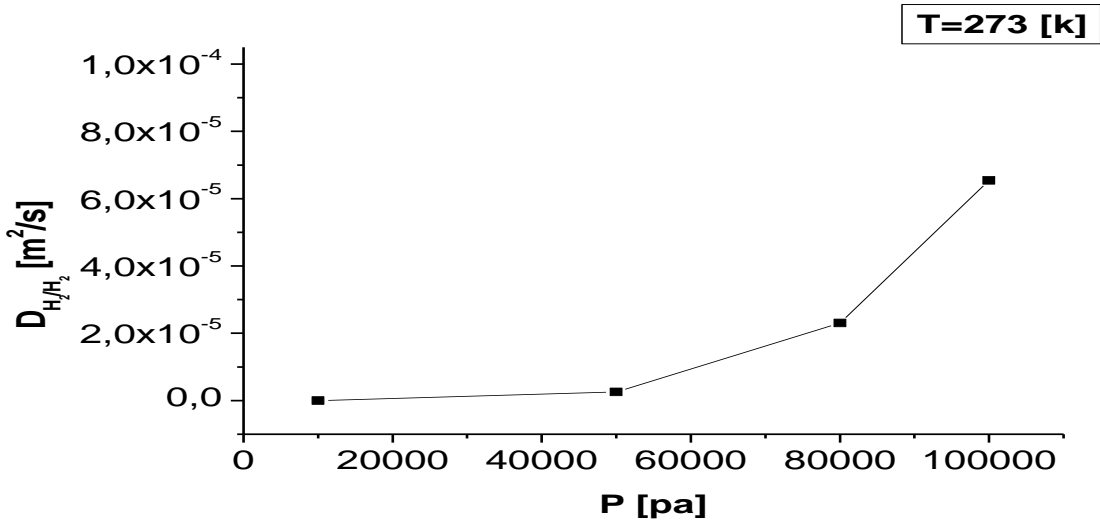


الشكل (4.3): تغيرات معامل الانتشار بدلالة درجة الحرارة في ضغط ثابت

نلاحظ أن كلما ازدادت درجة حرارة بكميات كبيرة نقص معامل الانتشار للغاز بكميات صغيرة جدا بحيث تكون مهملة، فمن المفروض ان يكون التأثير متزايد بارتفاع درجة الحرارة وذلك لتأثير عوامل أخرى منها الحجم فكلما غيرنا في درجة الحرارة تغيرت قيمته.

جدول 5.3: تغيرات حجم الخلية وكمية المادة بدلالة الضغط

P [pa]	Vcel [m ³]	n (mole)
$2 \cdot 10^4$	$4.615 \cdot 10^{-24}$	$4.06 \cdot 10^{-22}$
$4 \cdot 10^4$	$2.3075 \cdot 10^{-24}$	$4.06 \cdot 10^{-22}$
$6 \cdot 10^4$	$1.53 \cdot 10^{-23}$	$4.06 \cdot 10^{-22}$
$8 \cdot 10^4$	$1.153 \cdot 10^{-23}$	$4.06 \cdot 10^{-22}$
$1 \cdot 10^5$	$9.2301 \cdot 10^{-24}$	$4.06 \cdot 10^{-22}$



الشكل (5.3): تغيرات معامل الانتشار بدلالة الضغط في درجة حرارة ثابتة

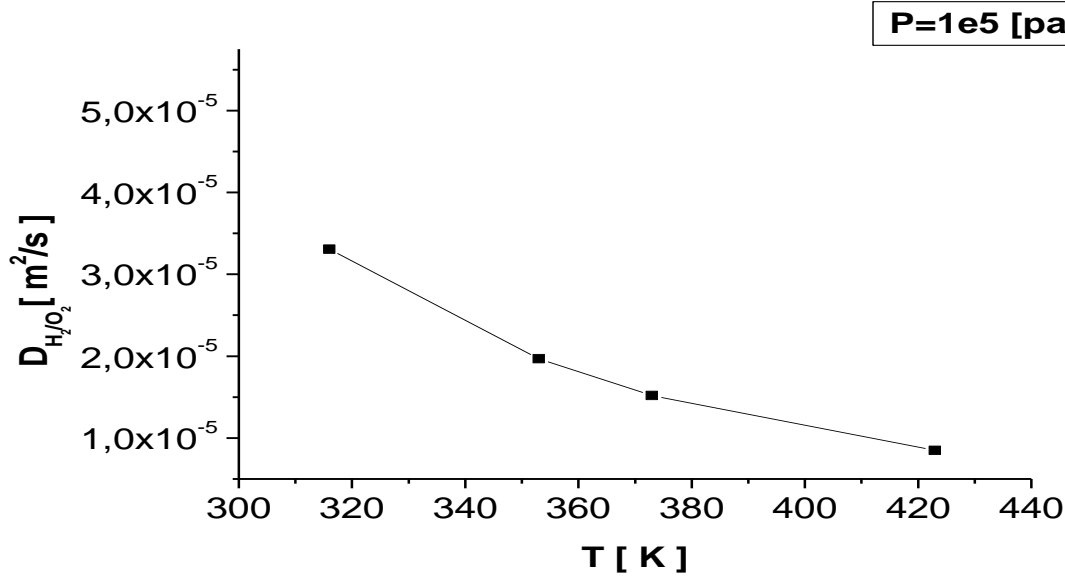
من المنحنى نلاحظ أن كلما يزداد الضغط يؤدي الى زيادة طفيفة لمعامل الانتشار، ويرجع سبب التناسب الطردي الى ان الطاقة الحركية لجزيئات الغاز ترتفع بزيادة الضغط مما يزيد نشاط الجزيئات وبالتالي تزداد سرعة الانتشار كما ان قيمة الحجم تتغير كلما غيرنا في الضغط.

2.3 انتشار الهيدروجين في الاكسجين :

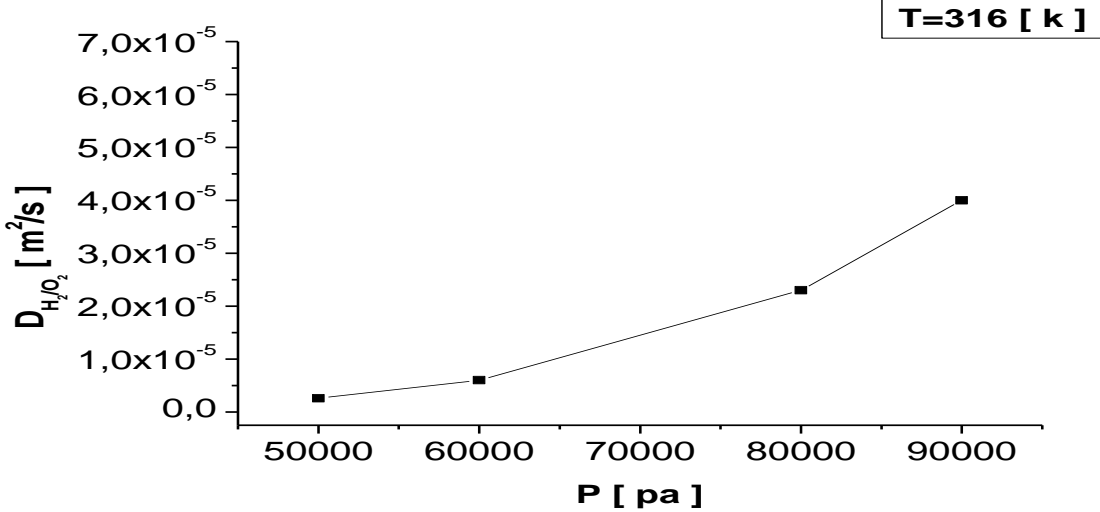
الجدول 3. 3: قيم بعض المقادير المستعملة في المحاكاة بالنسبة لانتشار الهيدروجين في الاكسجين

vol [m ³]	1.335495 *10 ⁻²¹
Vcel[m ³]	1.068396 *10 ⁻²³
λ[m]	9.099954 *10 ⁻²⁹
a[m]	2.202473 *10 ⁻⁸
V _{moy} [m/s]	1829.172

3. 2. 1: منحنيات خاصة بانتشار الهيدروجين في الاكسجين مع الملاحظات



الشكل (6.3): تغيرات معامل انتشار الهيدروجين في الاكسجين بدلالة درجة الحرارة في ضغط ثابت



الشكل (7.3): تغيرات معامل انتشار الهيدروجين في الاكسجين بدلالة الضغط في درجة حرارة ثابتة

مقارنة بين المنحنيات الخاصة بالانتشار الذاتي للهيدروجين بالمنحنيات الخاصة بانتشار الهيدروجين في الاكسجين فهي من نفس الرتبة المتحصل عليها فيما يخص تأثير الضغط ودرجة الحرارة.

خلاصة عامة

خلاصة عامة

ظاهرة الانتشار من اهم الظواهر المتواجدة في الطبيعة، وقد عرفت من قبل عدة علماء (أينشتاين، فيك، براون) ومن اهم الخصائص المميزة لهذه الظاهرة هو معامل الانتشار.

في هذه المذكرة قمنا بالتعريف لهذه الظاهرة، تطرقنا الى العلاقات الرياضية النظرية لحساب معامل الانتشار، انجزنا برنامج بلغة الفور ترون يقوم بتقدير معامل الانتشار لبعض الغازات، استعملنا المحاكاة بطريقة الديناميكا الجزيئية التي تعتمد على خوارزمية فيرلي.

توصلنا مما سبق الى النتائج التالية:

- ✓ خلال المحاكاة تكون حركة جزيئات الغاز حركة عشوائية.
- ✓ من خلال المحاكاة تحصلنا على قيم تجريبية لمعامل الانتشار من نفس الرتبة مع القيم المحسوبة نظريا في بحوث سابقة
- ✓ يتأثر معامل الانتشار بالضغط ودرجة الحرارة

قائمة المراجع

قائمة المراجع

- [1] <http://ar.phy.azllab.com>
- [2] <http://m.marefa.org>
- [3] (Oum-Elkheir Soulimani, "mise en marche de l'appareil<diffusion dans les liquides et les gaz> et mesure de la diffusivité de quelques composés organiques", mémoire master, Kasdi Merbeh, Ouargla, 2013, N° 9-10-12-13-14).
- [4] (م. نور الين إبراهيم إسماعيل، م. محمد كمال عبد العزيز، "آليات انتقال المادة"، 2017/10/30)
- [5] (د. عماد الدين وصفي، "فسيولوجيا النبات"، الطبعة الأولى، المكتبة الأكاديمية، الدقي_ القاهرة، 1418هـ/1998م)، ص 57).
- [6] (د. محب طه صقر، "أساسيات كيميوحيوية فسيولوجيا النبات"، كلية الزراعة، جامعة المنصورة)
- [7] (د. عمر بن عبد الله الهزازي، "كيمياء المحاليل ونظرية حركة الغازات"، الجزء الأول، 2017/4/7، ص 9).
- [8] (عبد القادر سويقات، "دراسة لنصف الناقل الجرمانيوم المطعم للاستعمال في المكونات الإلكترونية الضوئية"، أطروحة دكتوراه، جامعة قاصدي مرباح، ورقلة، 2016، ص 47-48).
- [9] (Dr.K.Wenger, "Masse Transfer Estimation Of Diffusivités", lecteur8, 8/11/1017).
- [10] (L. Menguy, "Diffusion De Particules", Lycée Montesquieu, Le Mans, octobre 2017).
- [11] (R.B. BIRD, W.E.STEWART et E.N. LIGHTFOOT, "Transport Phenomena", Wiley International Edition, New York et London, 1960).
- [12] (R.H. PERRY et D.W.GREEN, "Perry's Chemical Engainées Herdbook", McGraw- Hill Companies, Inc., 1999).

[13](A. Kayode Coker," in fortran programme for Chemical process Design Analyse and simulation", 1995).

[14] (Okba Fouad, "Contribution à l'étude de la croissance des canites d'hydrogène dans le semi-conducteur", thèse doctorat, université Ferhat Abbas Sétif, 2011).

[15](عبدالقادر سويقات، "نمجه ومحاكاة انتشار المطعمات في السليسيوم والجرمانيوم أحادي البلورة"، مذكرة ماجستير، جامعة قاصدي مرباح ورقلة، 2012، ص 45-64-65-67).

[16] www.startimes.com

[17](د. عمر بن عبد الله الهزازي، "كيمياء المحاليل ونظرية حركة الغازات"، الجزء الخامس، 2017/4/7، ص 424).

[18](T.Abdhakim Alasadi," Gases in Arabic", Wasit University ,25avril 2016).

[19](د. حازم فلاح سكيك، "الديناميكا الحرارية"، جامعة الأزهر بغزة، (2001-2012)).

[20](د. براهيم محمود ناصر، "مبادئ أساسية في الفيزياء الإحصائية"، الطبعة الأولى، 6 جوان 2015).

[21] (د. صلاح عيد إبراهيم حمزة، "الديناميكا الحرارية"، 16.6.2011، جامعة بنها، الرياضة)

[22] (J.N. Israelachvili,"intermolecular and surface force", academic press, 2e edition, landers, 1997).

[23] (حمدون خوله، "المواد ثنائية البعد: دراسة الفونونات للجرافين بمحاكاة الديناميكا الجزيئية"، مذكرة ماستر، جامعة قاصدي مرباح، ورقلة، 2018).

[24](R. J. SADUS," Moléculaire Simulation of Fluides Théorie Algorithmme and Object-Orientation", 2nd Edition, Amsterdam : Elsevier Science, 2002).

[25] (Judicaël courant," Méthodes d'Euler, méthode de verlet", Lycée La Martinière Mon Plaisir, 28 /8/2016).

[26](Jimmy ROUSSEL,"Introduction à la physique statistique ",26janvier2019).

[27](Prof .F . khelfaoui," Méthodes et simulation Numériques", chapitre II, 2006-2007).

[28](M.L.GERBER,"Description des forces de van der waals and le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité par le traitement explicite des interactions de longue portée", thèse doctorat .University Henri Poincaré, 16novembre2005).

[29](E.Dispian puio," principe de la dynamique moléculaire", Grenoble France ,2015).

[30](K. Meier, A. Laesecke, S. Kabelac," A Moléculaire Dynamics Simulation Study of the Self-Diffusion Coefficient and Viscosity of the Lennard Jones Fluide", International Journal of Thermophysics, Vol. 22, No. 1, 2001).

ملخص:

في هذا العمل قمنا بإجراء محاكاة بالديناميكا الجزيئية التي تعتمد أساسا على خوارزمية فيرلي. اعتبرنا أن القوة المؤثرة على جزيئات الغاز هي قوى فاند فالس حيث صممنا برنامج بلغة الفور ترون يتوافق مع الخصائص الفيزيائية للغاز. قمنا بإعطاء مواضع وسرعات ابتدائية. يتوافق توزيع السرعات مع توزيع ماكسويل بولتزمان. قمنا بتتبع حركة الجزيئات خلال أزمنة صغيرة. بتطبيق خوارزمية فيرلي قمنا بحساب القوى المؤثرة على الغاز كما قمنا بحساب التسارع لكل جزيء.

استنتجنا ان طريقة المحاكاة بالديناميكا الجزيئية تعطينا قيما لمعامل الانتشار الذاتي للهيدروجين ($6.54 * 10^{-5}$) قريبة نسبيا من القيم المحسوبة نظريا ($12,85 * 10^{-5}$)

الكلمات المفتاحية: الانتشار - معامل الانتشار - خوارزمية فيرلي -الديناميكا الجزيئية

Résumé :

Dans ce travail, nous avons effectué une simulation par la dynamique moléculaire basée principalement sur l'algorithme de Verlet. Nous avons considéré que la force exercée sur les molécules de gaz est celle de Vander Waals. Nous avons écrit un programme dans le langage de fortran compatible avec les propriétés physiques du gaz. Nous avons donné des positions initiale et des vitesses aux molécules en fonction de la distribution de Maxwell Boltzmann, et nous avons suivi le mouvement des particules pendant des petites périodes. En appliquant l'algorithme de Verlet, nous avons également calculé les forces agissant sur le gaz et calculé l'accélération de des molécules. Nous avons conclu que la méthode de simulation par la dynamique moléculaire permet d'avoir des valeurs de coefficient de diffusion pour H₂ ($6,54 * 10^{-5}$) cette valeur est relativement proches de la valeur calculée théoriquement ($12,85 * 10^{-5}$).

Mot Clés : Diffusion, Coefficient de Diffusion, Algorithme de Verlet, Dynamique Moléculaire

Summary:

In this work, we have simulate gas motion by a molecular dynamics simulation based mainly on the Verlet algorithm. We have considered that the force exerted on gas molecules is that of Vander Waals. We wrote a program in FORTRAN language compatible with the physical properties of gas. We have given initial positions and velocities to the molecules as a function of the Maxwell Boltzmann distribution. We have followed the motion of the particles during small dt periods. By applying Verlet's algorithm, we also calculated the forces acting on the gas and calculated the acceleration of molecules. We concluded that the dynamics molecular simulation method allows obtained values of diffusion coefficient for H₂ ($6.54 * 10^{-5}$) this value is relatively close to the theoretically calculated value ($12.85 * 10^{-5}$).

Key words: Diffusion, Diffusion Coefficient, Varlet's Algorithm, Molecular Dynamics