جامعة قاصدي مرباح ورقلة
كلية الرياضيات وعلوم المادة
قسم الفيزياء ,مخبر الإشعاع البلازما وفيزياء السطوح

حساب معاملات الانتشار ودراسة تاثير درجة الحرارة والضغط عليها

الطالبة
باشي هاجر
سود صفاء

Hadjerbachi1995@gmail.com

المشرف : بـاباحنـي أم الخير

مقدمة:

- معامل الانتشار مقدار مهم في دراسة ظاهرة انتشار المواد.
- توجد عدة طرق لحساب معامل انتشار المواد منها:التجريبية ,العلاقات الرياضية و المحاكاة العددية.
- في هذا العمل نقوم بحساب معامل الانتشار لغاز باستعمال طريقة المحاكاة بالديناميكا الجزيئية

تعريف : معامل الانتشار هو مقدار مميز لظاهرة انتشار المادة , يقيس النسبة بين التدفق المولي بسبب الانتشار الجزيئي وتدرج التركيز للأنواع الكيميائية ويرمز له ب D ويقدر بوحدة m^2/s

توجد عدة طرق لحساب معامل الانتشار :

1/طرق تجريبية :مثلا بالنسبة لانتشار سائل ملون في الماء نقوم بقياس المساحة التي ينتشر فيها السائل الملون والزمن المستغرق لدلك ثم نحسب النسبة المتوسطة بعد تكرار العملية.

2/حساب معامل الانتشار باستعمال العلاقات الرياضية من بينها :

حالة غاز	حالة سائل	حالة صلب
$D_{AB}=\frac{0.001858T^{3/2}M_{AB}^{1/2}}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D}$	$D_{AB}=\left(\chi_A D_{BA}^{\circ}+\chi_B D_{AB}^{\circ}\right)\beta_A$	$D=D_0\exp\left[-\frac{E}{KT}\right]$

3/ حساب معامل الانتشار باستعمال احدى طرق المحاكاة العددية كطريقة الديناميكا الجزيئية .

خطوات حساب معامل الانتشار

خوارزمية فيرلي [2]:

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

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

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

نحسب معامل الانتشار باستعمال العلاقة التالية [3]

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

حساب معامل الانتشار بالمحاكاة بالديناميكا الجزيئية :

- نحدد بعض المقادير المميزة للغاز كالضغط و درجة الحرارة.
- نعين السرعات والمواضع الابتدائية.
- حساب المواضع الجديدة في الخطوة الأولى من قانون الحركة يعطى بالعلاقة التالية : $r=\frac{1}{2}\alpha_x t^2+v_0 t+r_0$
- تعيين مواضع الذرات rp خلال ازمنة صغيرة dt ونحسب السرعة v عند هذه المواضع بواسطة خوارزمية فيرلي .
- نستعمل كمون فاندرفالز لاستنتاج القوة المؤثرة بين الجزيئات
- القوة المطبقة على كل جزيء تعطى بالعبارة التالية [1]:

$$F_{k,i}=6r^{-7}\left[\frac{2\mu_1^2\mu_2^2}{3(4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r)^2k_B}+\frac{\alpha_1\mu_2^2+\alpha_2\mu_1^2}{(4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r)^2}+\frac{3h}{2}.\frac{\alpha_1\alpha_2}{(4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}.\frac{\nu_1.\nu_2}{\nu_1+\nu_2}\right]$$

1- J.N.Israelachvili,intermolecular and surface forces ,academic press,2e edition ,londres,1997
2- http://femto-physique.fr/omp/methode_de_verlet.php,consultée le 4 avril 2016
3- K. Meier,2 A. Laesecke,3 and S. Kabelac , A Molecular Dynamics Simulation Study of the Self-Diffusion Coefficient and Viscosity of the lennard-jones fluid ,internation jornal of thermophysic, vol,22N° 1,2001