

بررسی و مطالعه گرانیروی های بخار سدیم در حالت های مختلف ترمودینامیکی

علی حسین محمد ظاهری

دانشگاه پیام نور-ایران

تاریخ دریافت: 1397/12/26 تاریخ پذیرش: 1398/12/22

در این پژوهش، محاسبه و بررسی تغییرات گرانیروی های سدیم تبخیر شده در حالت های مختلف ترمودینامیکی انجام شده است. در حالت کلی، این ضریب انتقال شاره ها به صورت انتگرال زمانی تابع تنش متناسب با وسکوزیته بیان می گردد. از آنجا که محاسبه مستقیم این تابع غیر ممکن است، بسط تیلور آن محاسبه شد که از شش ضریب اولیه، ضریب های فرد صفر و ضریب های زوج آن غیر صفر می باشند. بدیهی است که منشأ گرانیروی در سطح میکروسکوپی، تأثیر اتم ها بر یکدیگر از طریق پتانسیل بین اتمی می باشد. در این کار، شبه پتانسیل اشکرافت با تقریب های ایکومورا- بوتسامی در نظر گرفته شد. همچنین، برای انجام این محاسبات، داشتن تابع توزیع ذرات ضروری است. برای تابع توزیع متناسب با این کار، روش شبیه سازی دینامیک مولکولی که توسط کامپاشی و همکارانش به دست آمده، مدنظر قرار داده شد. از طرف دیگر، تابع حافظه ای موری نقش بسیار مهمی در محاسبه تمامی ضریب های انتقال شاره ها ایفا می کند. متداول ترین روش نظری محاسبه ضریب های انتقال شاره ها، روش گرین-کوبو است که در این پژوهش از آن روش بهره جست شد. به دلیل عدم وجود کار تجربی و یا نظری در این دامنه، یافته ها را نمی توان مقایسه کرد. ولی با توجه به محاسبه گرانیروی های روبیدیم دقیقاً "به همین شیوه در گذشته، این یافته ها قابل قبول می باشند.

کلید واژه: تابع بستگی زمانی، تابع حافظه ای موری، فرمول گرین-کوبو، ضریب های انتقال، گرانیروی سدیم

مقدمه

در حقیقت، حل دقیق تابع بستگی زمانی برای شاره ها غیر ممکن است، زیرا سامانه یک سامانه چند ذره ای است، بنابراین، تبدیل حل دقیق تابع بستگی زمانی به یک تابع مناسب از تابع حافظه ای یک گام اساسی و مهم در بررسی حرکت ذره ها در شاره ها می باشد. البته باید به این نکته مهم توجه کرد که راحل دقیقی برای به دست آوردن شکل مناسب تابع حافظه ای وجود ندارد. بنابراین در سه دهه اخیر، پژوهشگران این حوزه تعدادی تابع بر اساس تحقیق و تجربه (و نه ریاضی دقیق) برای تابع حافظه ای فرض کرده اند [9-15]. در این پژوهش، شکل سکانت های پیربولیک آن اختیار شد زیرا این شکل از تابع حافظه ای قبلاً هم به کار برد شد و یافته های قابل قبولی به دست آمد [4]. لازم به ذکر است که فرمول های مربوط ضریب های بسط تیلور تابع همبستگی زمانی مربوط به گرانیروی، در پیوست مقاله قبلی آورده شده است [4].

بخش نظری

همانطور که در قسمت قبلی گفته شد، در محاسبه ضریب های انتقال شاره های چگال و غیر چگال به روش نظری، بیشترین روش مورد استفاده، فرمول گرین-کوبو است. در این فرمول ضریب انتقال به شکل انتگرال زمانی تابع همبستگی زمانی که متناسب با ضریب انتقال است، محاسبه می گردد. شکل عمومی فرمول گرین-کوبو به صورت زیر است [5]:

$$\eta = \mu \int_0^{\infty} \Omega(t) dt \quad (1)$$

در رابطه بالا، η بیانگر ضریب انتقال، μ نشان دهنده برخی کمیت های ماکروسکوپی وابسته به سامانه ذره ها و $\Omega(t)$ تابع بستگی زمانی متناسب با ضریب انتقال می باشد. به عنوان نمونه، اگر η بیانگر ضریب پخش باشد، آن گاه $\Omega(t)$ بیانگر وابستگی آماری متغیر سرعت با خودش (در دو زمان مختلف) است. در این مقاله، η نشان دهنده گرانیروی برشی است که تابع مناسب با آن، تابع بستگی خود به خودی تنش برشی می باشد. در این

گرانیروی یکی از مهم ترین ضریب های انتقال شاره ها می باشد که بیانگر مقاومت شاره در مقابل نیروی برشی است. به عبارت دیگر، این کمیت تعیین کننده مقاومت شاره در مقابل تغییر شکل تدریجی حاصل از تنش برشی می باشد. در دماهای بالا، انداز گیری تجربی ضریب های انتقال از جمله گرانیروی، اگر غیر ممکن نباشد، بسیار سخت است. به همین دلیل، پژوهشگران برای محاسبه این کمیت ها، بیشتر به روش های نظری و شبیه سازی روی آورده اند [1-3]. متداول ترین روش نظری محاسبه ضریب های انتقال شاره ها، روش گرین-کوبو می باشد. به متازگی، ما گرانیروی های حجمی و طولی بخار رقیق روبیدیم را به همین روش و در شش حالت ترمودینامیکی گزارش کرده ایم [4]. بر اساس بررسی های انجام شده، مطالعه کافی جهت بررسی گرانیروی فلزات به ویژه فلزات قلیایی انجام نشده است. همین امر موجب انگیزه بیشتر ما جهت بررسی و محاسبه گرانیروی برشی فلزات قلیایی از جمله سدیم گردید. در این روش، ضریب های انتقال به صورت انتگرال زمانی یک تابع همبستگی زمانی متناسب با ضریب انتقال بیان می شوند. در واقع، یک تابع همبستگی زمانی، تابعی است که ارتباط آماری بین دو یا چند متغیر تصادفی را که وابسته به فاصله زمانی یا فضایی متغیر هاست، بیان می کند [5]. اگر تابع همبستگی زمانی برای یک متغیر، ولی در دو نقطه زمانی (یا فضایی) متفاوت به کار برده شود، اصطلاحاً "به آن تابع همبستگی خود به خودی گفته می شود. در حالی که ضریب انتقال مدنظر، گرانیروی برشی باشد، این تابع همبستگی زمانی، تابع همبستگی خود به خودی تنش عرضی خواهد بود. یکی از روش های محاسبه تابع همبستگی خود به خودی تنش عرضی، تابع حافظه ای موری با استفاده از بسط تیلور تابع مورد بحث (تابع همبستگی خود به خودی) خواهد بود [6-8]. نقش تابع حافظه ای موری در مطالعه خواص انتقال و دینامیک شاره ها بسیار اساسی است. زیرا محاسبه مستقیم تابع همبستگی خود به خودی تنش عرضی بسیار مشکل است.

با مقایسه معادله‌های 6 و 7 و اندکی محاسبه، ارتباط بین $S(t=0)$ و $M_1(t)$ (در فضای فوریه-لاپلاس، به شکل زیر به دست می‌آید:

$$\tilde{S}(\omega) = -\frac{S(t=0)}{\omega + \tilde{M}(\omega)} \quad (8)$$

همچنین، از مقایسه معادله 1 با معادله 8، فرمول گرانیوی برحسب $M(t)$ و $S(t=0)$ به شکل زیر به دست می‌آید:

$$\eta = \frac{i}{VK_B T} \frac{S_0}{\tilde{M}(0)} \quad (9)$$

از رابطه 9 معلوم است که برای محاسبه گرانیوی، به داشتن تابع حافظه‌ای $M(t)$ نیاز است. به عبارت دیگر، مسئله محاسبه $S(t)$ ، حالا به داشتن تابع حافظه‌ای $M_1(t)$ کاهش پیدا کرده است. در خلال سه دهه اخیر، چندین رابطه براساس رفتار شارها پیشنهاد شده است [16]. که در این کار مشابه مقاله قبلی [4]، از رابطه زیر استفاده گردید:

$$M_1(t) = a \text{Sech}(bt) \quad (10)$$

در رابطه بالا، a و b ضریب‌های ثابتی هستند که با اعمال شرایط مرزی در زمان‌های کوتاه به دست می‌آیند. البته رابطه 10، از معادله غیرخطی زیر نیز قابل محاسبه است [5]:

$$\frac{d^2 M_1(t)}{dt^2} - b^2 M_1(t) + \frac{2b^2}{b^2} M_1^3(t) = 0 \quad (11)$$

ضریب‌های a و b در معادله‌های 10 و 11 به شکل زیر به دست می‌آیند:

$$a = M_1(0) \frac{S_2}{S_0}, b^2 = \frac{S_4}{S_2} - \frac{S_2}{S_0} \quad (12)$$

از معادله‌های 9-12، فرمولی برحسب ضریب‌های بسط فوریه و ویژگی‌های سامانه برای گرانیوی به دست می‌آید که به شکل زیر نوشته شده است:

$$\eta = \frac{2}{\pi} \frac{n}{k_B T} \left(\frac{S_0^2}{S_2} \right) \left(\frac{S_4}{S_2} - \frac{S_2}{S_0} \right)^{1/2} \quad (13)$$

در رابطه بالا، n چگالی عددی اتم‌ها را نشان می‌دهد. گفتنی است که در گذشته، از این فرمول برای مطالعه گرانیوی شارها در شرایط متفاوت استفاده شده است [4 و 17].

نتایج

برای محاسبه گرانیوی‌های سدیم در شرایط گفته شده و با استفاده از معادله 13، ضریب‌های بسط تیلور یعنی $(i = S_0, 2, 4)$ ها باید محاسبه گردند. رابطه‌های مربوط به این ضریب‌ها در پیوست مقاله قبل آمده است

صورت فرمول گرین-کوبو جهت محاسبه گرانیوی برشی به شکل زیر می‌باشد [5]:

$$\eta_s = \frac{1}{VK_B T} \int_0^\infty S^s(t) dt \quad (2)$$

در رابطه (2) عبارت‌های S^s و T, K_B, V, η_s به ترتیب بیانگر کمیت‌های گرانیوی برشی، حجم سامانه، ثابت بولتزمن، دمای سامانه برحسب کلوین و تابع بستگی خودبه‌خودی تنش برشی را نشان می‌دهند. تابع بستگی خودبه‌خودی تنش برشی از رابطه زیر محاسبه می‌گردد:

$$S(t) = \langle J_{XY}(t) J_{XY}(0) \rangle \quad (3)$$

در رابطه بالا، براکت‌های زاویه‌ای $\langle \rangle$ ، بیانگر میانگین کانونی و $J_{XY}(t)$ نشان‌دهنده یک متغیر دینامیکی در زمان t است که توسط فرمول زیر به کمیت‌های فیزیکی دیگر سامانه مرتبط می‌گردد.

$$J_{XY}(t) = \sum_{i=1}^N m V_{ix}(t) V_{iy}(t) + F_{iy} X_i(t) \quad (4)$$

در رابطه بالا، عبارت‌های m, V_{ix} و V_{iy} به ترتیب بیانگر کمیت‌های جرم، مولفه‌های x و y سرعت ذره i ام (ذره‌ای که حرکت آن را در سامانه مورد بررسی قرار گرفته است) می‌باشند. همچنین، F_{iy} نشان‌دهنده مولفه y نیروی وارد بر ذره و $X_i(t)$ مولفه x بردار مکان این ذره در لحظه t هستند.

حل دقیق $S(t)$ برای سیال‌های واقعی بسیار دشوار است، زیرا این کمیت شامل ارتباط یک متغیر دینامیکی با خودش در دو زمان متفاوت است. بنابراین، بسط تیلور این کمیت در نظر گرفته شد که به شکل زیر به دست می‌آید:

$$S(t) = S_0 - S_2 \frac{t^2}{2} + S_4 \frac{t^4}{4} \dots \quad (5)$$

در این رابطه، کمیت‌های $(i = S_0, 2, 4)$ ، ضریب‌های غیرصفر بسط تیلور گفته شده می‌باشند. از طرف دیگر، بررسی‌ها نشان داد که تابع بستگی زمانی از معادله حرکت زیر پیروی می‌کند:

$$\frac{dS(t)}{dt} + \int_0^t S(\tau) M_1(t-\tau) d\tau = 0 \quad (6)$$

در معادله 6، $M_1(t)$ تابع حافظه‌ای موری مرتبه اول را نشان می‌دهد که در لحظه $t=0$ ، با ضریب‌های بسط تیلور، $S(t)$ معادله (5) ارتباط دارد [5]. باید توجه داشت که دو کمیت $S(t)$ و $M_1(t)$ در فضای فوریه-لاپلاس به یکدیگر مرتبط می‌گردند. بنابراین، تبدیل فوریه-لاپلاس $S(t)$ به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\tilde{S}(\omega) = i \int_0^\infty \exp(-i\omega t) S(t) dt \quad (7)$$

جدول 1. دمای سامانه بر حسب کلوین، جرمی، مکان اولین صفر پتانسیل σ و عمق پتانسیل ε مطابق با چهار حالت ترمو دینامیکی مورد بحث

حالت	T (K)	ρ (g cm ⁻³)	σ (Å)	ε (10 ⁻¹² erg)
1	1073	1/340	2/5125	0/0895
2	1373	1/250	2/4310	0/0950
3	1673	0/940	2/4250	0/1250
4	1873	0/750	2/3215	0/1500

جدول 2. مقدارهای قاعده‌های جمع برای توابع استرس بستگی طولی، S_2 و S_4 ها به ترتیب برحسب ε^2 ، $\varepsilon^3/m^2\sigma^2$ و $\varepsilon^4/m^2\sigma^4$ هستند

حالت	S_0^1	S_{22}^1	S_{23}^1	S_2^1	S_{42}^1	S_{43}^1	S_4^1
1	-15/755	-761/72	-232/28	529/44	100940	17268	115790
2	-10/255	457/24	-189/20	268/03	132900	15016	146910
3	-5/0765	322/44	-139/67	182/77	86171	6566/2	92358
4	-4/3356	210/70	-90/647	120/06	46609	-453/01	45469

جدول 3. مقدارهای قاعده‌های جمع برای توابع استرس بستگی حجمی S_0 ، S_2 و S_4 ها به ترتیب برحسب ε^2 ، $\varepsilon^3/m^2\sigma^2$ و $\varepsilon^4/m^2\sigma^4$ هستند

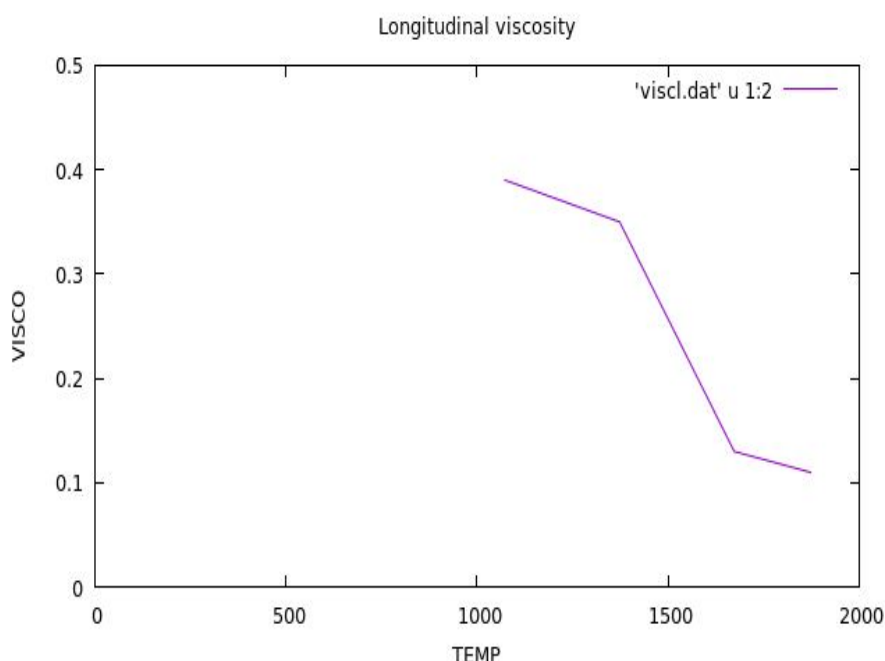
حالت	S_0^B	S_{22}^B	S_{23}^B	S_2^B	S_{42}^B	S_{43}^B	S_4^B
1	-10/825	565/14	-139/30	425/84	45106	11908	57014
2	-9/2761	402/24	-117/86	284/38	60809	6331/7	67141
3	-5/6955	277/85	-88/821	189/03	39123	2865/2	41988
4	-4/7281	181/79	-52/497	129/29	21112	207/16	21319

جدول 4. مقدارهای قاعده‌های جمع برای توابع استرس بستگی برشی S_0 ، S_2 و S_4 ها به ترتیب برحسب ε^2 ، $\varepsilon^3/m^2\sigma^2$ و $\varepsilon^4/m^2\sigma^4$ هستند

حالت	S_0^S	S_{22}^S	S_{23}^S	S_2^S	S_{42}^S	S_{43}^S	S_4^S
1	-3/9277	172/71	-69/948	102/77	44285	224/22	44509
2	-0/73321	70/107	-54/212	15/895	57539	-2481/8	55057
3	0/46337	52/835	-38/924	13/911	37685	-471910	32966
4	0/29525	35/907	-29/665	6/2423	20514	-6401/5	14113

جدول 5. گرانیوی های برشی، η_s ، حجمی، η_B و طولی، η_l ، بر حسب سانتی پواز برای چهار حالت سدیم

حالت	η_l	η_s	η_B	$\eta_B^* = \eta_l - \frac{4}{3\eta_s}$
1	0/39	0/15	0/19	0/19
2	0/35	0/076	0/187	0/25
3	0/13	0/03	0/11	0/09
4	0/11	0/023	0/082	0/078



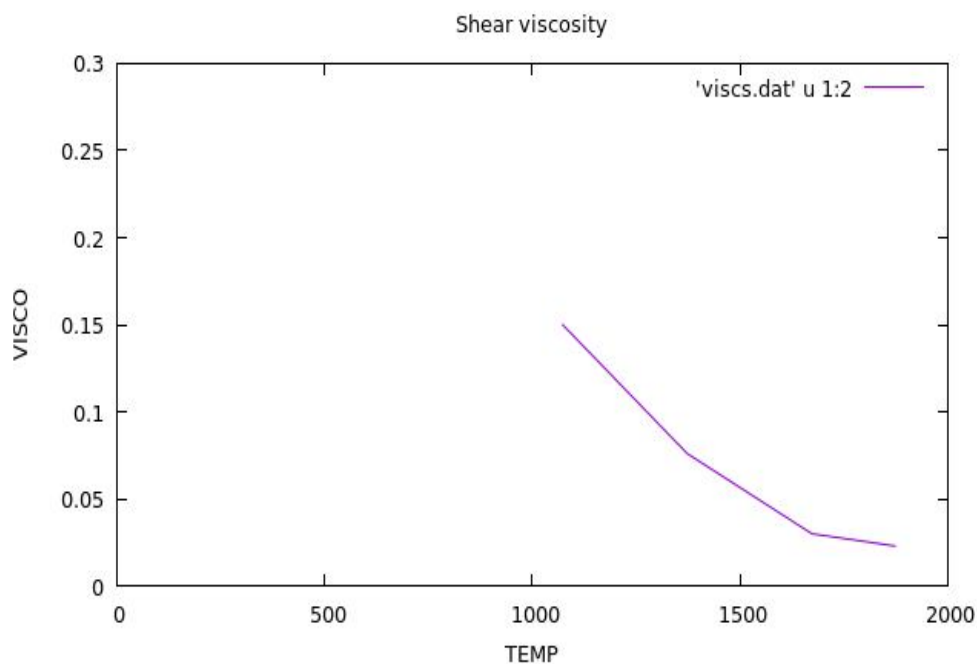
شکل 1. نمودار گرانیوی بر حسب دما برای گرانیوی طولی سدیم برای چهار حالت ترمودینامیکی.

جدول 1 آمده است. در این جدول دمای سامانه بر حسب کلونین و همچنین پارامتر تعیین کننده ε عمق پتانسیل و نیز σ که مشخص کننده اولین نقطه برخورد تابع پتانسیل با محور مکان می باشد، آمده است. لازم به ذکر است که از این مقادیر برای محاسبه $(i = S_i; 0, 2, 4)$ ها استفاده شده است. با توجه به این که فرمول های مربوط به ضریب های بسط $S(t)$ شکل انتگرالی دارند، این انتگرال ها به روش عددی گارس محاسبه شده اند که یافته های حاصل از این محاسبات در جدول های 4-2 آمده است.

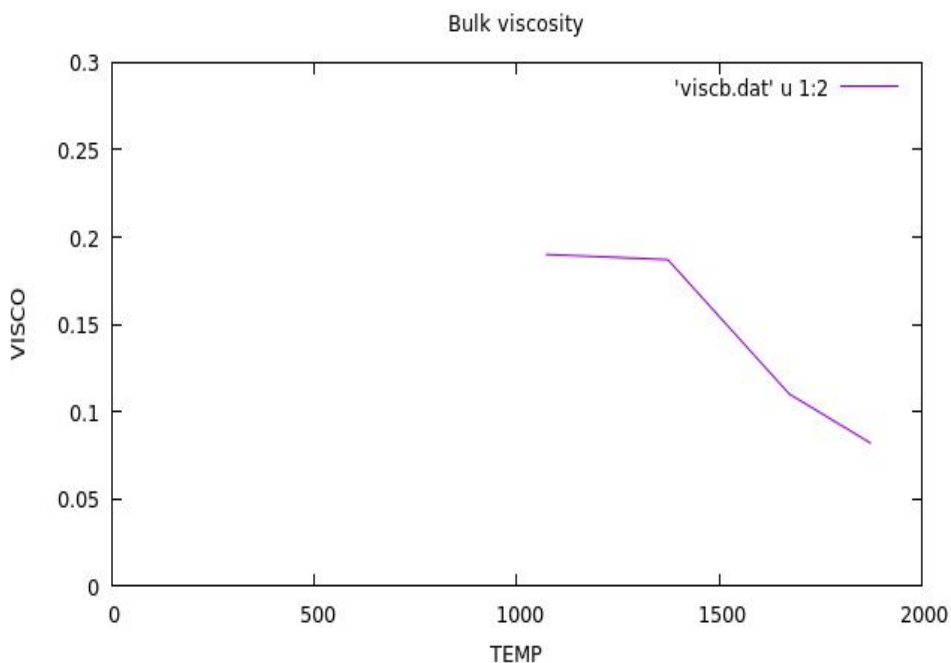
در این جدول ها، نماد S_{nm} نشان دهنده m اتم دارای تاثیر متقابل بر یکدیگر در n امین ضریب بسط می باشد. مشاهده می گردد که بخشی از ضریب های بسط که نشان دهنده نقش برهم کنش سه اتم است، (S_{23} و S_{43})، نقش بسیار مهمی را در محاسبه های مربوط ایفا می کنند. برای اثبات این بیان و مشخص کردن تغییر زمانی $S(t)$ ، می توان از نسبت S_2 به S_2 و نیز S_{43} به S_4 استفاده کرد. این نسبت ها بیانگر این است که

[4]. این ضریب ها به روش عددی، برای چهار حالت مختلف ترمودینامیکی اتم سدیم تبخیر شده محاسبه گردیدند. در فرمول های مربوط به این ضریب ها، تابع پتانسیل، $U(r)$ ، و همچنین تابع توزیع دوتایی اتم ها، $g(r)$ ، وجود دارند. برای تابع پتانسیل، با توجه به نوع اتم (سدیم)، از تابع شبه پتانسیل اشکرافت همراه با تقریب های ایکمورا-ایوتسامی استفاده شد. برای تابع توزیع، از نتیجه کار کال و کامبایاشی که $g(r)$ را به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی به دست آورده اند [18]، استفاده شد. کمیت دیگری که در رابطه های بسط $S(t)$ ظاهر گردیده است، تابع توزیع سه-تایی اتم ها، $g_3(r, r_1)$ ، می باشد. برای محاسبه این کمیت، از تقریب برهم نهی کیرک وود استفاده شد. این تقریب توسط پژوهشگران دیگری نیز مورد استفاده قرار گرفته که خطای قابل توجهی در مقایسه با روش های دیگر نداشته است [19].

مشخصات مربوط به چهار حالت ترمودینامیکی مورد بحث در



شکل 2. نمودار گرانشی بر حسب دما برای گرانشی برشی سدیم برای چهار حالت ترمودینامیکی.



شکل 3. نمودار گرانشی بر حسب دما برای گرانشی حجمی سدیم برای چهار حالت ترمودینامیکی.

برای حالت های اول تا چهارم بر حسب دما ترسیم شده است. همانطور که در اشکال نیز دیده می شود با افزایش دما ویسکوژزیت کاهش پیدا می کند. همچنین از دمای 1500 کلون به بالا گرانشی تقریباً ثابت است که علت آن افزایش انرژی جنبشی و در نتیجه کاهش زمان تأثیر متقابل اتمها بر

تغییر زمانی $S(t)$ به شدت به نقش سه اتم وابسته است. با اعمال مقدارهای این جدولها در فرمول 13، گرانشیهای سدیم تبخیرشده در چهار حالت ترمودینامیکی به دست آمده است (جدول 5). در شکل های 1 تا 3 به ترتیب گرانشیهای طولی، برشی و حجمی

یکدیگر می‌باشند.

نتیجه گیری

از جدول 5، مشاهده می‌گردد که مقدارهای گرانیروی‌ها با دما نسبت عکس دارند. یعنی با افزایش دما مقدار گرانیروی کاهش می‌یابد. علت این است که با افزایش دما، میزان انرژی جنبشی اتم‌ها افزایش پیدا کرده و در نتیجه، زمان ارتباط و وابستگی بین دو و سه اتم دارای اندرکنش متقابل با یکدیگر کمتر شده است. بنابراین گرانیروی کاهش پیدا کرده است.

مراجع

- McGraw- Hill, New York, 1980.
- 8) K. Tankeshwar, K.N. Pathak, S. Rangathan, J. Phys. Condens. Matter 8 (1996) 10847.
 - 9) K. Tankeshwar, K.N. Pathak, S. Rangathan, J. Phys. C: Solid State Phys. 20 (1988) 5749.
 - 10) K. Tankeshwar, K.N. Pathak, G.S. Dubey, J. Phys. C: Solid State Phys. 21 (1988) L811.
 - 11) D.M. Heyes, J.G. Powles, Mol. Phys. 71 (1990) 781.
 - 12) U. Balucani, V. Tognetti, R. Vallauri, Phys. Rev. A 19 (1998) 177.
 - 13) K. Tankeshwar, K. N. Pathak, J. Phys. Condens. Matter. 7 (1995) 5729.
 - 14) M.H. Lee, J. Phys. Condens. Matter 8 (1996) 3755.
 - 15) K. Tankeshwar, K.N. Pathak, J. Phys. Condens. Matter 6 (1995) 591.
 - 16) K. Tankeshwar, K.N. Pathak, S. Rangathan, J. Phys. C: Solid State Phys. 21 (1988) 3607.
 - 17) S.K. Sharma, K. Tankeshwar, J. Phys. Condens. Matter 9 (1997) 6185.
 - 18) G. Kahl, S. Kambayashi, J. Phys.: Condens. Matter 6 (1994) 10897.
 - 19) K. Tankeshwar, K.N. Pathak, S. Rangathan, J. Phys. Condens. Matter 2 (1990) 5891.
 - 1) N. Galamba, C.A.N. De Castro, J.F. Ely, J. Phys. Chem. B 108 (2004) 3658.
 - 2) N. Galamba, C.A.N. De Castro, J.F. Ely, J. Chem. Phys. 120 (2004) 8676.
 - 3) N. Galamba, C.A.N. De Castro, J. Chem. Phys. 122 (2005) 224501.
 - 4) A.H.M. Zaheri, S. Srivastava, K. Tankeshwar, J. Phys. Condens. Matter 15 (2003) 6683.
 - 5) J.P. Hansen, I.R. McDonald, Theory of Simple Liquids, Academic Press, New York, 1986.
 - 6) D.A. McQuaire, Statistical Mechanics Harper and Row, New York, 1976.
 - 7) J.P. Boon, S. Yip, Molecular Hydrodynamic,