محاسبۀ تغییرات چگالی میانگین سیال محدود شده با بر همکنش یوکاوا

محمدرضا جلالی * / مسعود کاوش تهرانی **

چکیده

در روش شبیه‌سازی رایانه‌ای برای بررسی ساختار سیالات، لازم است که چگالی میانگین سیال را بدانیم تا از روی آن تعداد ذرات در هر سلول شبیه‌سازی شده را محاسبه کنیم. در این مقاله با استفاده از روش کیم که ترکیب دو روش تقریب چگالی وزنی تارازونا و تقریب MHNC است و توسط ریکیزن و آگوستی در نظریۀ تابعی چگالی ارائه شده است، چگالی میانگین برای سیال یوکاوای محدود شده بین دو دیوار تخت و موازی در دو حالت، یکی با برهمکنش دیوار سخت و دیگری با برهمکنش جاذبه‌ای یوکاوا در دماهای مختلف محاسبه و با یکدیگر مقایسه شده است.

کلید واژه

نظریه تابعی چگالی، چگالی میانگین، سیال یوکاوا.

مقدمه

وجود پتانسیل خارجی در یک دستگاه بس ذره‌ای باعث برهم زدن توزیع یکنواخت ذرات در آن دستگاه می‌شود. برای بررسی چنین دستگاه غیریکنواختی روشهای متعددی وجود دارد. سه روش عمده جهت بررسی ساختار سیالات ناهمگن وجود دارد، که عبارت است از:

۱. روش معادلات انتگرالی: این روش در دهه‌های ۷۰ و ۸۰ میلادی کاربرد وسیعی داشته و به‌تدریج جای خود را به روشهای دیگر داده است (٤).

۲. نظریۀ تابعی چگالی: امروزه این روش از روش معادلات انتگرالی پیشی گرفته و جهت بررسی خواص سیالات ناهمگن شامل مرز مشترک جامدـ مایع، گاز ـ مایع،

* عضو هیئت علمی دانشگاه پیام نور، مرکز اصفهان
** عضو هیئت علمی دانشگاه صنعتی مالک اشتر

گذارهای فاز، لایه‌های نازک و بررسی ذرات کلوئیدی معلق در سیال کاربرد وسیعی پیدا کرده است **(۲,۵)**.

۳. روش شبیه‌سازی رایانه‌ای: این روش به‌عنوان یک روش نیمه‌تجربی در بررسی سیالات ناهمگن به‌کار می‌رود. در روش شبیه‌سازی رایانه‌ای لازم است که چگالی میانگین مایع را بدانیم تا از روی آن تعداد ذرات در هر سلول شبیه‌سازی شده را محاسبه کنیم **(۱۱)**.

در این مقاله دستگاهی را در نظر می‌گیریم که در آن دو صفحهٔ موازی و متناهی را در حجم بزرگی از سیال فرو برده‌ایم، به طوری که دو دیوار کاملاً در مایع فرو رفته باشند. بدین ترتیب مایع محدود شده بین دو دیوار با تودهٔ مایع کاملاً در ارتباط است. این دستگاه در بررسی لایه‌های نازک، چسبندگی مایعات و مباحث الکتروشیمی دارای کاربردهای مهمی است **(۳)**. با استفاده از آنسامل کانونی بزرگ در نظریهٔ تابعی چگالی به ساختار این دستگاه می‌توان پی برد. برای تعیین چگالی میانگین نیاز به نمایهٔ چگالی است. برای حل این مسئله از روش کیم که ترکیب دو روش تقریب چگالی وزنی تارازونا و تقریب MHNC است استفاده شد**(۵)**.

نظریهٔ تابعی چگالی کیم

در این مسئله ذارت سیال با برهمکنش یوکاوا را بین دو دیوار تخت و موازی که به فاصلهٔ h از یکدیگر قرار گرفته‌اند، در نظر می‌گیریم. براساس نظریهٔ تابعی چگالی، پتانسیل بزرگ دستگاه را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\Omega[\rho] = F_{ex}[\rho] + \int d\mathbf{r}\,\rho(\mathbf{r})[U(\mathbf{r}) - \mu] + \beta^{-1}\int d\mathbf{r}\,\rho(\mathbf{r})\{\ln[\Lambda^3\rho(\mathbf{r})] - 1\} \qquad (۱)$$

که در آن $F_{ex}[\rho]$ انرژی آزاد اضافی ناشی از برهمکنش بین ذرات دستگاه است. $U(\mathbf{r})$ پتانسیل خارجی، μ پتانسیل شیمیایی تعادلی، $\beta = 1/k_B T$ و Λ طول موج دوبروی است. با کمینه کردن پتانسیل بزرگ نسبت به چگالی خواهیم داشت:

$$\ln[\Lambda^3\rho(\mathbf{r})] + \beta\frac{\delta F_{ex}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r})} + \beta[U(\mathbf{r}) - \mu] = 0 \qquad (۲)$$

با استفاده از تعریف تابع همبستهٔ مستقیم تک‌ذره‌ای برای سیال ناهمگن مطابق زیر خواهیم داشت:

$$C^{(1)}(\mathbf{r};[\rho]) = -\beta\frac{\delta F_{ex}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r})} \qquad (۳)$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \Lambda^{-3}e^{\beta\mu}\exp[-\beta U(\mathbf{r}) + C^{(1)}(\mathbf{r};[\rho])]$$

برای چگالی حالت کپه‌ای، ρ_0، معادله به صورت زیر خواهد بود:

$$\rho_0 = \Lambda^{-3}e^{\beta\mu}\exp[C^{(1)}(\rho_0)] \qquad (۵)$$

که در اینجا $C^{(1)}(\rho_0)$ تابع همبستهٔ مستقیم تک‌ذره‌ای برای سیال همگن است. با ترکیب دو معادلهٔ فوق خواهیم داشت:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0\exp[-\beta U(\mathbf{r}) + C^{(1)}(\mathbf{r};[\rho]) - C^{(1)}(\rho_0)] \qquad (۶)$$

برای محاسبهٔ نمایهٔ چگالی، پتانسیل خارجی و تابع همبستهٔ مستقیم تک‌ذره‌ای نیاز است. در این روش تابع همبستهٔ مستقیم تک‌ذره‌ای و پتانسیل خارجی را به دو قسمت کرهٔ سخت(hs) و قسمت جاذبه‌ای، (att) تقسیم می‌کنیم **(۱,۵)**.

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0\exp[-\beta U_{hs}(\mathbf{r}) + C_{hs}^{(1)}(\mathbf{r};[\rho]) - C_{hs}^{(1)}(\rho_0)] \times\exp[-\beta U_{att}(\mathbf{r}) + C_{att}^{(1)}(\mathbf{r};[\rho]) - C_{att}^{(1)}(\rho_0)] \qquad (۷)$$

در اینجا، برای قسمت کرهٔ سخت از تقریب چگالی وزنی تارازونا که نتایج قابل قبولی برای سیال کرهٔ سخت دارد **(۱۰)** و برای قسمت جاذبه‌ای از تقریبی که ریکیزن و آگوستی آن را توسعه داده‌اند **(۹)** استفاده می‌کنیم. در تقریب چگالی وزنی تارازونا تابع همبستهٔ مستقیم سیال کرهٔ سخت از رابطهٔ زیر به دست می‌آید.

(۸)

$$C(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{2\Delta\psi'(\rho_\circ)}{k_B T}\left.\frac{\delta\bar{\rho}(\mathbf{r})}{\delta\rho(\mathbf{r}')}\right|_{\rho_\circ} - \frac{\Delta\psi''(\rho_\circ)\rho_\circ}{k_B T}\int d\mathbf{r}''\left.\frac{\delta\bar{\rho}(\mathbf{r}'')}{\delta\rho(\mathbf{r})}\right|_{\rho_\circ}\left.\frac{\delta\bar{\rho}(\mathbf{r}'')}{\delta\rho(\mathbf{r}')}\right|_{\rho_\circ} - \frac{\Delta\psi'(\rho_\circ)\rho_\circ}{k_B T}\int d\mathbf{r}''\frac{\delta^2\bar{\rho}(\mathbf{r}'')}{\delta\rho(\mathbf{r}')\delta\rho(\mathbf{r}'')}$$

که در اینجا:

(۹)

$$\psi'(\rho_\circ) = \left.\frac{\partial\psi}{\partial\bar{\rho}(\mathbf{r})}\right|_{\bar{\rho}(\mathbf{r})=\rho_\circ}, \quad \psi''(\rho_\circ) = \left.\frac{\partial^2\psi}{\partial[\bar{\rho}(\mathbf{r})]^2}\right|_{\bar{\rho}(\mathbf{r})=\rho_\circ}$$

و ψ انرژی آزاد اضافی بر ذره است کـه مـی‌تـوان آن را از معادلهٔ حالت کارنهان استرلینگ مطابق رابطـهٔ زیـر بـه‌دسـت آورد:

$$\beta\psi = \frac{\eta(4-3\eta)}{(1-\eta)^2} \qquad (۱۰)$$

در اینجا $\eta = \pi\rho\sigma^3/6$ و σ قطر کرهٔ سخت است. تارازونـا برای جلوگیری از تغییرات شدید در چگالی و رسیدن به نتـایج مناسب، چگالی میانگین محلی را مطابق زیر تعریف کرد:

$$\bar{\rho}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}\,\rho(\mathbf{r})\,w(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|;\bar{\rho}(\mathbf{r})) \qquad (۱۱)$$

که در اینجا تابع وزنی w، خود نیـز تـابعی از چگـالی میانگین محلی است و مطابق زیر تعریف می‌شود:

$$w(r,\rho) = w_\circ(r) + w_1(r)\rho + w_2(r)\rho^2 + \ldots \qquad (۱۲)$$

مقادیر $w_i(r)$ ها در مرجع **(۷)** داده شده است. به ایـن ترتیب معادلهٔ (۷) به صورت زیر در خواهد آمد:

(۱۳)

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_\circ \exp\left\{-\beta\left[\Delta\psi(\bar{\rho}(\mathbf{r})) + \int d\mathbf{r}'\rho(\mathbf{r}')\Delta\psi(\bar{\rho}(\mathbf{r}'))\frac{\delta\bar{\rho}(\mathbf{r}')}{\delta\rho(\mathbf{r})} - \Delta\psi(\rho_\circ) - \Delta\psi''(\rho_\circ)\rho_\circ\right]\right\}$$

$\times$(قسمت جاذبه ای)

در تقریـب نظریـهٔ MHNC، ریکیـزن تـابع همبسـتهٔ مسـتقیم تـک‌ذره‌ای را بسـط تیلـور تـابعی داد و تـا جملهٔ‌مرتبهٔ دوم را از این بسط را نگه داشت:

(۱۴)

$$C^{(1)}_{att}(\mathbf{r};[\rho]) = C^{(1)}_{att}(\rho_\circ) + \int d\mathbf{s}\,C^{(2)}_{att}(|\mathbf{r}-\mathbf{s}|;\rho_\circ)[\rho(\mathbf{s})-\rho_\circ] + \frac{1}{2}\iint d\mathbf{s}\,d\mathbf{t}\,C^{(3)}_{att}(\mathbf{r},\mathbf{s},\mathbf{t},\rho_\circ)[\rho(\mathbf{s})-\rho_\circ][\rho(\mathbf{t})-\rho_\circ] + \ldots$$

در این تقریـب نیـاز بـه تـابع همبسـتهٔ مسـتقیم دو و سه‌ذره‌ای است. برای تابع همبستهٔ مسـتقیم دو ذره‌ای داریم:

$$C^{(2)}_{att}(\mathbf{r};\rho_\circ) = C^{(2)}_{Yu}(\mathbf{r};\rho_\circ) - C^{(2)}_{hs}(\mathbf{r};\rho_\circ) \qquad (۱۵)$$

که در اینجـا $C^{(2)}_{hs}(\mathbf{r};\rho_\circ)$ تـابع همبسـتهٔ مسـتقیم دو ذره‌ای کرهٔ سخت است که با اسـتفاده از تقریـب PY مطابق زیر به دست می‌آید **(٦)**:

$$C^{(2)}_{hs}(r;\rho_\circ) = -\frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4} + \frac{6\eta(1+\eta/2)^2 r}{(1-\eta)^4\sigma} - \frac{\eta(1+2\eta)^2 r^3}{(1-\eta)^4\sigma^3} \quad r<\sigma$$
$$= 0 \quad r>\sigma \qquad (۱۶)$$

$C^{(2)}_{Yu}(r;\rho_\circ)$ تـابع همبسـتهٔ مسـتقیم دو ذره‌ای سـیال یوکاوا است و با استفاده از تقریب کروی میانگین کـه دارای نتایج کاملاً خوبی است، مطابق زیـر بـه‌دسـت می‌آید **(۸)**:

(۱۷)

$$C^{(2)}_{Yu}(r;\rho_\circ) = a - br/\sigma - \eta a r^3/2\sigma^3 - v\sigma[1-\exp(-\lambda r/\sigma)]/\lambda r - v^2\sigma[\cosh(\lambda r/\sigma)-1]/[2r\beta\varepsilon_f\lambda^2\exp(\lambda)] \quad r<\sigma$$
$$= \beta\varepsilon_f\sigma\exp[-\lambda(r-\sigma)/\sigma]/r \quad r>\sigma$$

در اینجا ضرایب a، b و v و غیره پارامترهایی هسـتند که در مرجع **(۸)** آمده است. در تقریب چگالی تابعی ریکیزن تابع همبستهٔ سه‌ذره‌ای به صورت سـادهٔ زیـر در نظر گرفته شده است **(٦)**:

(۱۸)

$$C^{(3)}_{att}(\mathbf{r},\mathbf{s},\mathbf{t},\rho_\circ) = B\left(\frac{6}{\pi\sigma^3}\right)\int d\mathbf{u}\,\theta\left(\frac{\sigma}{2}-|\mathbf{r}-\mathbf{u}|\right)\theta\left(\frac{\sigma}{2}-|\mathbf{s}-\mathbf{u}|\right)\theta\left(\frac{\sigma}{2}-|\mathbf{r}-\mathbf{u}|\right) = BL_1$$

که $\theta(x)$ تابع هویساید پله‌ای و B ثابتی است کـه مطـابق زیر به گونه‌ای انتخاب می‌گردد که فشار صـحیح کپـه‌ای در معادلهٔ حالت برای سیال همگن را ارائه دهد:

$$B = \frac{\rho_\circ^2 \beta \Delta\Psi'(\rho_\circ) + \rho_\circ - 0.5\rho_\circ^2 \int d\mathbf{r}\, C_{att}^{(2)}(r;\rho_\circ) - \beta P}{\rho_\circ^3 L_1} \qquad (۱۹)$$

با ترکیب روابط (۱۴) تا (۱۹) و قرار دادن آنها در قسمت جاذبه‌ای رابطهٔ (۱۳) و حل عددی آن می‌توان نمایهٔ چگالی را که دارای نتایج قابل قبولی نسبت به روشهای دیگر است و با شبیه‌سازی رایانه‌ای تطابق خوبی دارد، به دست آورد (۱).

بحث و نتیجه

در اینجا با حل عددی رابطهٔ (۱۳) نمایهٔ چگالی برای فواصل مختلف دو دیوار (h) محاسبه شده است. با داشتن نمایهٔ چگالی می‌توان از رابطهٔ زیر چگالی میانگین را به‌دست آورد:

$$\overline{\rho}(h) = \frac{1}{h}\int_\circ^h \rho(z)dz \qquad (۲۰)$$

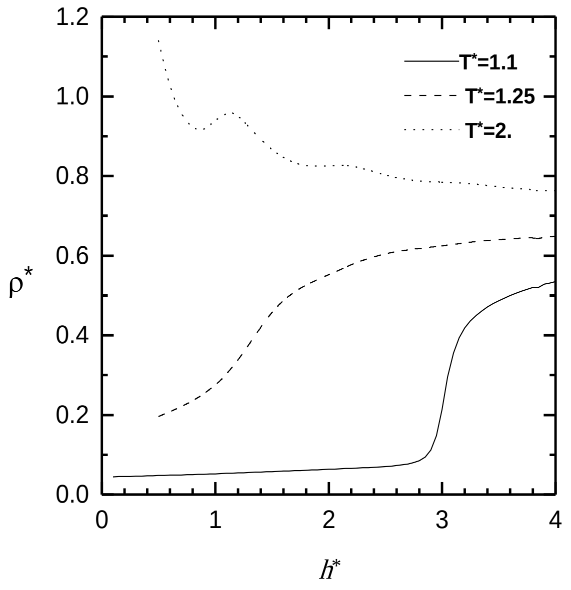
چگالی میانگین سیال یوکاوای محدود شده بین دو دیوارتخت، با پتانسیل سخت:

$$U_{ext}(z) = 0 \qquad z > 0$$
$$= \infty \qquad z < 0 \qquad (۲۱)$$

و بین دو دیوار تخت با پتانسیل جاذبه‌ای است:

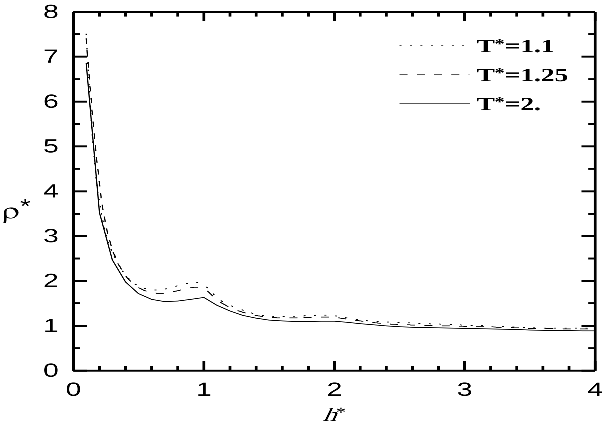
$$U_{ext}(z) = \circ \qquad z > \circ$$
$$= -\beta\varepsilon_w \exp(-\lambda z/\sigma) \qquad z < \circ \qquad (۲۲)$$

به ازای چگالی کپه‌ای کاهش‌یافتهٔ $\rho_\circ^* = \rho_\circ\sigma^3 = \circ.7$ در دماهای کاهش‌یافتهٔ $T^* = 1/\beta\varepsilon_f$، ۱٫۱، ۱٫۲۵ و ۲ محاسبه و با یکدیگر مقایسه شده است.

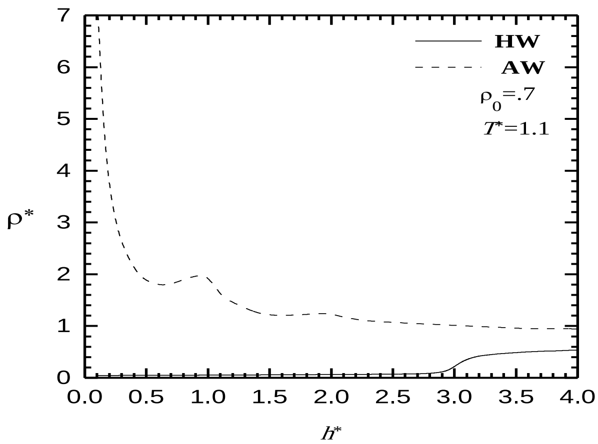


شکل ۱. تغییرات چگالی میانگین کاهش یافته $\rho^* = \overline{\rho}(h)\sigma^3$، برحسب فاصلهٔ کاهش یافته برای چگالی کپه‌ای کاهش یافتهٔ ۰٫۷ در دماهای مختلف کاهش‌یافته برای سیال یوکاوا در مجاورت دیوار تخت و سخت.

همچنان‌که در شکل ۱ مشاهده می‌شود برای برهم‌کنش سیال یوکاوا با دیوار سخت، چگالی میانگین وابسته به دما است و با افزایش دما، چگالی میانگین افزایش می‌یابد. اما با افزایش فاصلهٔ دو دیوار تمامی آنها به سمت مقدار کپه‌ای میل می‌کنند که نشانگر کاهش اثرات پتانسیل دیوار بر روی سیال است. از دیگر نتایج به‌دست آمده، نوسانی شدن تغییرات چگالی میانگین با افزایش دما است. در اینجا برای دمای کاهش‌یافته ۲ درجه سانتی‌گراد بیشینه‌هایی در چگالی میانگین در نقاطی تقریباً برابر قطر سیال یوکاوا مشاهده می‌گردد. در شکل (۲) چگالی میانگین سیال یوکاوا در مجاورت دیوار با پتانسیل جاذبه‌ای برحسب فاصلهٔ کاهش یافته، $h^* = h/\sigma$، رسم شده است.



شکل۲. مطابق شکل۱، اما برای سیال یوکاوا در مجاورت دیوار تخت با پتانسیل جاذبه‌ای



شکل۳. تغییرات چگالی میانگین کاهش یافته بر حسب فاصلهٔ کاهش یافته برای چگالی کپه‌ای۰/۷ در دمای کاهش یافتهٔ ۱/۱. خط پیوسته مربوط به دیوار سخت (HW) و خط چین مربوط به دیوار جاذبه‌ای (AW) است.

با توجه به شکلهای ۲ و ۳ مشاهده می‌گردد که اثرات پتانسیل جاذبه‌ای بسیار شدیدتر از اثرات دما بر روی چگالی میانگین است. با افزایش فاصلهٔ بین دو دیوار اثرات پتانسیل جاذبه‌ای دیوار کاهش یافته و چگالی میانگین به سمت چگالی کپه‌ای میل می‌کند. در اینجا برای هر سه دمای کاهش یافته فرم نوسانی چگالی میانگین در نقاطی تقریباً برابر قطر سیال یوکاوا مشاهده می‌گردد. این بیشینه‌ها ناشی از اثرات ابعاد ذرات است که در تقریب تارازونا مد نظر قرار گرفته شده است.

منابع

۱. کاوش تهرانی، مسعود، (۱۳۸۱) مقالـه نامـهٔ «کنفـرانس فیزیـک ایـران»، زنجان؛

۲. مرادی، محمود و کاوش تهرانی، مسعود (۱۳۷۹)، مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران؛

3. Choudhury, N. and Ghosh, S. K. (1997), *J. Chem. Phys.* 106, 1576;

4. Evans, R. (1992) , *Inhomogeneous Fluid*;

5. Young-Wha, K.; Soon-Chul, K. (1998), *J. Korean Physics Soc;*

6. Moradi, M. and Kavosh Tehrani, M., (1999) *Can. J. Phys;*

7. Olivares-Rivas, W., Degreve, L., Henderson, D. and Quintana, J. (1997), *J.Chem. Phys*.106, 8160;

8. Rickayzen, G. and Augousti (1984), A., *Mol. Phys*. 52, 1355;

9. Tarazona, P.(1985), *Phys. Rev. A*, 31, 2673;

10. Van Megen, W. J. and Snook, I. K. (1981), *J. Chem Phys. 74, 1409.*■