



دانشگاه زنجان

دانشکده علوم

پایان نامه کارشناسی ارشد
گرایش ماده چگال

عنوان

بررسی ویژگی های ساختاری و ترمودینامیکی
مخلوط دوتایی گازی از مولکول های ناهمسانگرد به
روش شبیه سازی

نگارش

محمد مهدی شفیعی

استاد راهنما

دکتر محمد ابراهیم فولادوند

استاد مشاور

دکتر فرهاد جعفرپور

اسفند ۸۹

دانشگاه زنجان

دانشکده علوم

رساله کارشناسی ارشد

بررسی ویژگی های ساختاری و ترمودینامیکی مخلوط دوتایی گازی از
مولکول های ناهمسانگرد به روش شبیه سازی

نگارش: محمد مهدی شفیعی

امضاء:

استاد راهنما: دکتر محمد ابراهیم فولادوند

امضاء:

استاد ممتحن داخلی: دکتر علی نجفی

امضاء:

استاد ممتحن خارجی: دکتر مهدی حبیبی

تقدیم بہ خانوادہ عزیزم

سپاسگذاری

نور خدایست که ذات را
رقص کنان بی سرو بی پانخوست
رقص در این نور خرد کن کز او
تحت شری تابه شریا خوش است

مولانا

خدا را را سپاس می گویم برای آفرینش دوست داشتن و آموختن. و پدر و مادرم را سپاس می گویم که به من دوست داشتن را آموختند. و سپاس می گویم استاد راهنما خود را که چندی از دوست داشتنی ها به ویژه پارسی گزینی در نوشتار این پایان نامه را به من آموخت. امید است با بکار بردن واژگان اصیل پارسی در این پایان نامه گامی در راستای پایداری و سربلندی زبان پارسی برداشته باشیم.

همچنین سپاسگزارم از برادرم بنخاطر همکاری صمیمانه اش در زمانی که این پژوهش انجام می شد، از اساتید و کارکنان مرکز تحقیقات فیزیک نظری و ریاضیات به ویژه آقای عراقی، خانم محمدی، آقای دکتر صفارزاده و آقای دکتر منتظری بنخاطر کمک ها و همکاری های صمیمانه شان.

چکیده

در بسیاری از سامانه های فیزیکی و زیستی رفتار ذرات همانند رفتار ذرات کشیده و برهم کنش آنها مانند برهم کنش سخت است. بسیاری از مسایل مهم مسائل یک بعدی هستند که در سالهای گذشته رویکرد زیادی به آنها شده است. بکار گیری روش های مکانیک آماری و شبیه سازی رایانه ای شتاب زیادی به بررسی اینگونه سامانه ها داده است. در این پایان نامه با مروری کوتاه بر روش های شبیه سازی و ویژگی های مواد، دو گونه گاز یک و شبه دو بعدی از میله های سخت بررسی شده است. ویژگی های ترمودینامیکی و آماری گاز یک بعدی با شبیه سازی مونت کارلو و شبیه سازی دینامیک مولکولی و گاز شبه یک بعدی با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است. برای شبیه سازی دینامیک مولکولی دو میله نیاز به دانستن کمیت هایی که بر پایه آنها میله ها حرکت و با هم برخورد می کنند داریم که این پیش نیازها بدست آمده اند. ویژگی های ساختاری گاز یک بعدی با گاز دو بعدی تفاوت زیادی دارد. نشان داده شده که رفتار تابع میانگین مربع جابجایی در زمان های طولانی به یک مقدار ثابت میل می کند. این مقدار که نشان گر تحرک پذیری میله ها است برای گاز یک بعدی با دیواره های بازتابی به روش تحلیلی بگونه دقیق بدست آمده و با نتایج شبیه سازی همسنجی (مقایسه) شده است. همانگونه که چشم داریم میزان تحرک ذرات با فاصله آنها از دیواره ها هم نوا است.

پیش‌گفتار

توصیف سامانه‌های بس ذره‌ای بخش بزرگی از فیزیک را در بر می‌گیرد. با اینکه فورمول بندی مکانیک آماری در بسیاری از زمینه‌ها می‌توانند بکار روند مسایلی که می‌توانند بگونه دقیق حل شوند محدود هستند. یکی از روش‌های بررسی این سامانه‌ها بکار بردن روش شبیه‌سازی مولکولی است. این روش در مطالعه گستره زیادی از سامانه‌های مولکولی و پدیده‌های شاره‌ای بکار می‌رود. امروزه هدف بسیاری از شبیه‌سازی‌ها، بررسی مولکول‌های پیچیده مانند پروتئین‌هاست. در حالی که در گذشته بیشتر رویکرد مردم به بررسی اتم‌ها و مولکول‌های ساده بود. انگیزه افزایش رویکرد به شبیه‌سازی مولکولی پیشرفت‌ها در نظریات، الگوریتم‌ها و سخت‌افزارهای رایانه‌ای است. روش کلی همه شبیه‌سازی‌ها برگزیدن یک پتانسیل برهم‌کنشی میان ذرات است. سپس با کمک قوانین حرکت نیوتن مکان و سرعت ذره‌ها در زمان بدست می‌آیند. سرانجام ویژگی‌های تعادلی و خود همبستگی‌ها با میانگین‌گیری زمانی بدست می‌آیند. الگوریتم‌های شبیه‌سازی به دو دسته بزرگ دقیق و احتمالی بخش می‌شوند. دسته نخست که با نام دینامیک مولکولی شناخته می‌شود با رویکرد به دینامیک ذرات در زمان انجام می‌شود و دسته دوم که مهمترین آنها الگوریتم مونت کارلو^۱ است بر پایه حرکت‌های احتمالی است. شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای روی سامانه‌های کراندار و با شرایط مرزی گوناگون انجام می‌شوند. یکی از پتانسیل‌های کاربردی پتانسیل سخت است. این پتانسیل که اندازه آن صفر یا بی‌نهایت است پس از گذشت سالها هنوز پتانسیل پر کاربردی برای ساده‌سازی و پافشاری روی ویژگی‌های ساختاری و آنتروپیک سامانه است. سامانه‌های پتانسیل سخت همچنین می‌توانند بعنوان مرجع و زمینه‌ای برای آزمایش ویژگی‌های دسته‌جمعی برای یک سامانه آرمانی باشد. بررسی ذرات سخت در یک بعد معمولاً آسان‌تر است. مطالعه سامانه‌های یک بعدی وجود ویژگی‌های نا بدیهی را در اینگونه سامانه‌ها روشن می‌کنند و همزمان بینشی ارزشمند از رفتار جمعی ذرات در بعد‌های بالا تر به ما می‌دهند. حل تحلیلی اینگونه سامانه‌ها هم انجام پذیرتر است و می‌توان نتایج محاسبات تحلیلی و شبیه‌سازی را با هم آزمود. بررسی مولکول‌های بزرگ یا حجم‌دار را تنکس با مطالعه مکانیک آماری ذرات گوی شکل در یک بعد آغاز کرد و هم اکنون هم این موضوع یکی از موضوعات مورد علاقه مردم است. پخش ذرات در یک بعد اهمیت زیادی در مطالعه سامانه‌های زیستی مانند کانال‌های بیولوژیک دارد. برای نمونه تجمع ذرات بزرگ در یاخته‌ها ضریب پخش ذرات را کاهش داده و با کاهش سرعت واکنش‌های بیوشیمیایی سبب تشکیل انبوهه‌ای از پروتئین‌ها می‌شود [۲]. همچنین در دستگاه‌هایی که نانو‌شاره‌ها را در بر دارند تجمع و برهم‌کنش اثرات ذرات با هم هر روز پر اهمیت‌تر می‌شوند. نمونه از اینگونه سامانه‌ها پخش ذرات با برهم‌کنش سخت در یک بعد است که به آن پخش تک‌مجرای^۲ می‌گویند. پخش تک‌مجرای هنگامی رخ می‌دهد که مسیر گذر ذرات چنان باریک باشد که ذرات نتوانند از کنار همدیگر رد شوند و بنابراین ترتیب ذرات در زمان بی‌تغییر بماند. از این رو مفهوم بنیادین پخش بعنوان پدیده‌ای که ناشی از آمیختگی فیزیکی ذرات است مود سوال است. مفهوم پخش تک‌مجرای نخستین بار چهل سال پیش در بیوفیزیک برای بررسی گذر آب و یون‌ها از میان کانال‌هایی با اندازه مولکولی در غشای یاخته‌ها معرفی شد. [۳]. از آن هنگام افزون بر سامانه‌های زیست‌شناختی [۴]، پخش تک‌مجرای در برهم‌کنش زنجیره‌های مارکوف در آمار [۵]، گذر مولکول‌های جذب‌شونده در ژئولیت‌ها [۶] و مهاجرت حمل‌کننده‌های بار الکتریکی در بسپارهای یک بعدی و رسانا‌های ابر یونی [۷] نیز بررسی شده‌اند. از آنجا که ذرات نمی‌توانند از کنار هم بگذرند حرکت ذرات حتی در زمان‌های طولانی به همدیگر وابسته است زیرا اگر یک ذره بخواهد جابجایی زیادی انجام دهد ذرات زیادی در همسایگی آن ذره باید همان جهت حرکت کنند. این همبستگی در رفتار تابع میانگین مربع جابجایی در زمان‌های طولانی نمایان می‌شود که پیش‌بینی می‌شود در زمان به شکل $t^{1/2}$ افزایش یابد. پس پخش تک‌مجرای ذرات با دو و سه بعد که در آنها قانون

^۱Monte Carlo

^۲Single File Diffusion

فیک برقرار است فرق دارد. همچنین تابع چگالی احتمال مکان یک ذره نوعی گاوسی است. رفتار $t^{\frac{1}{2}}$ میانگین مربع جابجایی و تابع چگالی احتمال نخستین بار در مرجع [۸] بدست آمد. جالب است که اشاره کنیم که تابع میانگین مربع جابجایی که رفتار $t^{\frac{1}{2}}$ دارد در حرکت مونومرهای در بسپار در مدل روسه^۳ نیز دیده می شود [۹]. با اینکه بیشتر کارها در زمینه پخش تک مجرای برای ذرات یکسان انجام شده است، پژوهش هایی هم در زمینه پخش ذرات سخت با ضریب پخش متفاوت نیز انجام شده است. این گونه مدل ها می تواند در بررسی بسیاری از سامانه ها مانند پخش پروتئین در طول یک زنجیره DNA بکار گرفته شود. در سال ۲۰۰۰ وی و دیگران [۱۰] آزمایشی ترتیب دادند و یک مدل تک مجرای را با محدود کردن کره های پارامغناطیسی برخورد کننده با قطر حدود چند میکرومتر در مجموعه گودال های دایره ای ساخته شده به روش فتولیتوگرافی ساختند. آنها توانستند مسیر ذرات را در زمان های طولانی بدست آورده و از آن رفتار نافیکی پخش ذرات و همچنین رفتار گاوسی تابع جابجایی ذرات را به روشی ببینند. در مرجع [۱۱] پخش یک ذره نوعی به روش تحلیلی از وابستگی زمانی تابع شرطی توزیع احتمال N ذره ای $P(\vec{x}, t | \vec{x}_0)$ (که \vec{x} بردار در فضای N بعدی است که مکان همه ذرات را نشان می دهد) بصورت تحلیلی بدست آمده است. همچنین می توانیم کاربرد پتانسیل سخت و حرکت تک مجرای را در سامانه ای از ذره های ناکروی که مرکز جرم آنها روی یک خط مستقیم است ببینیم. نخستین بار لویتس و دیگران [۱۲] پیشنهاد سامانه ای از ذرات در امتداد هم را دادند و نشان دادند که در چگالی بالا فشار رابطه ی ساده ای با خمیدگی ذرات در نقطه برخورد دارد. جهت گیری ذرات متقارن ناکروی به فازهای گوناگون در بلورهای مایع می انجامد. برای نمونه در فاز نماتیک هیچ نظم مکانی برای مرکز جرم ذرات وجود ندارد. از نخستین کارها در زمینه بلورهای مایع فهمیده شده بود که پخش آنتروپیک تابع انرژی آزاد مربوط به شکل های ناکروی می تواند بسیاری از ویژگی های سامانه را توضیح دهد. داد و ستد انرژی میان درجه آزادی انتقالی و چرخشی می تواند به ویژگی کشسانی نابدیهی در سامانه بیانجامد [۱۳]. به تازگی یک فورمول بندی که امکان محاسبه مستقیم ویژگی های کشسانی و فشار سامانه ای از ذرات متقارن ناکروی سخت را می دهد ارائه شده است [۱۵]. کاربرد و کانتور مکانیک آماری گاز یک بعدی از ذرات میله شکل که می توانند در دو بعد بچرخند ولی مرکز جرمشان روی یک خط ثابت شده است را بررسی کردند [۱۶]. این سامانه با وجود سادگی های مسئله یک بعدی می تواند بستر مناسبی برای آزمودن نظریه های دو بعدی باشد. این مدل می تواند گونه کلی تر گاز تنکس باشد که هنوز بینشی نابدیهی از داد و ستد انرژی درجات آزادی تراپردی و چرخشی دارد. این مدل را می توان بگونه دقیق حل کرد و ویژگی هایی مانند ضرایب کشسانی را بدست آورد. این پایان نامه شامل سه فصل است. در فصل نخست به پیش زمینه های لازم برای بررسی و شبیه سازی سامانه های یک بعدی از میله های سخت پرداخته شده است. در این فصل با آغاز از تعریف مفاهیم شبیه سازی به توضیح روش های شبیه سازی معمول و تکنیک هایی که در هنگام شبیه سازی به آنان نیاز داریم پرداخته شده است. همچنین بررسی زمینه نظری لازم برای برداشت های آماری از نتایج شبیه سازی انجام شده است و در پایان کمیت های که می توانیم از شبیه سازی بدست آوریم معرفی شده اند. در فصل دوم گاز یک بعدی از میله های سخت بررسی شده است. نخست کارهای انجام شده از آغازین تلاش ها تا تازه ترین پژوهش ها در این زمینه را مرور کرده و پس از آن تابع پارش و کمیت هایی مانند فشار را برای دو هنگرد گوناگون را بدست می آوریم. سپس نتایج شبیه سازی مونت کارلوی این سامانه را آورده و بحث می کنیم. در بخش پس از آن محاسبه تحلیلی دقیق برای تابع پارش و پخش در یک بعد ارائه شده است. این نتایج با شبیه سازی دینامیک مولکولی همسنجی (مقایسه) شده و دیگر کمیت های سامانه با روش دینامیک مولکولی نیز بدست آمده اند. در فصل پایانی گاز شبه یک بعدی از میله ای سخت بررسی شده اند. همانند فصل دوم این فصل را نیز با مرور بر کارهای انجام شده آغاز می کنیم. در ادامه چگونگی شبیه سازی را می آوریم. در پایان دستاورد های شبیه سازی و نتایج آورده شده و با کارهای پیشین سنجدیده می شوند.

^۳Rouse

فهرست مطالب

۱	آشنایی آغازین، مکانیک آماری و کمیت هایی که باید به دست آیند	۱
۱	۱.۱ درباره شبیه سازی	۱
۱	۱.۱.۱ سامانه، مدل و شبیه سازی	۱
۲	۲.۱.۱ مدل هایی برای شبیه سازی	۲
۲	۳.۱.۱ احتمال در برابر تعیین	۲
۳	۴.۱.۱ مروری بر حالت مایع	۳
۴	۵.۱.۱ نیرو های میان مولکولی	۴
۶	۶.۱.۱ روش های آزمایشگاهی	۶
۶	۲.۱ شبیه سازی به روش دینامیک مولکولی	۶
۷	۱.۲.۱ دینامیک برخورد	۷
۹	۲.۲.۱ دینامیک مولکولی رویدادگرا	۹
۹	۳.۱ دیگر جزئیات های شبیه سازی	۹
۱۲	۴.۱ شبیه سازی مونت کارلو	۱۲
۱۲	۱.۴.۱ شبیه سازی در هنگرد همدمما همفشار	۱۲
۱۳	۲.۴.۱ چند گونه از کاربرد های روش مونت کارلو	۱۳
۱۳	۵.۱ تحول زمانی و معادله حرکت	۱۳
۱۵	۶.۱ میانگین گیری هنگردی و میانگین گیری زمانی	۱۵
۱۶	۱.۶.۱ هنگردهای کانونی و همفشار-همدمما	۱۶
۱۸	۲.۶.۱ هنگرد ریز کانونی	۱۸
۱۹	۷.۱ چگالی ذرات و توابع توزیع	۱۹
۲۲	۸.۱ کمیت هایی که باید بدست آیند	۲۲
۲۲	۱.۸.۱ میانگین های ترمودینامیکی ساده	۲۲
۲۴	۲.۸.۱ ویژگی های ترمودینامیکی برآمده از افت و خیز ها	۲۴
۲۵	۳.۸.۱ ضرایب تراپردی	۲۵
۲۸	۲ گاز یک بعدی از میله های سخت	۲۸
۲۸	۱.۲ مروری بر کار های انجام شده	۲۸
۳۶	۲.۲ صورت بندی مسئله	۳۶
۳۷	۳.۲ تابع پارش در هنگرد ریز کانونی	۳۷
۳۹	۴.۲ شبیه ساز مونت کارلو	۳۹
۴۱	۵.۲ شبیه ساز دینامیک مولکولی	۴۱

۴۴	بدست آوردن میانگین مربع جابجایی	۶.۲
۵۷	نتایج شبیه سازی	۷.۲
۵۷	شبیه سازی دینامیک مولکولی	۱.۷.۲
۵۹	میانگین مربع جابجایی	۲.۷.۲
۶۳	نتیجه گیری	۸.۲
۶۵		۳ شبیه سازی گاز شبه یک بعدی	
۶۵	مروری بر کارهای انجام شده	۱.۳
۷۲	تشریح مساله	۲.۳
۷۲	شبیه سازی دینامیک مولکولی	۳.۳
۷۷	دینامیک برخورد دو میله	۱.۳.۳
۹۳	نتایج شبیه سازی	۴.۳
۹۹	نتیجه گیری	۵.۳

لیست تصاویر

- ۱.۱ روش های پژوهش: باید دانست که سامانه ای که می خواهیم بررسی کنیم می تواند حقیقی یا خود الگوی
از آن باشد [۱۹]. ۲
- ۲.۱ نموداری از یک گاز تک اتمی که نشان دهنده ی مرزها میان مایع، جامد S و بخار V [۲۳]. ۳
- ۳.۱ گونه های پتانسیل میان ذرات یک مایع [۲۳]. ۵
- ۴.۱ الگوریتم دینامیک مولکولی رویداد گرا برای ذره های سخت [۱۸]. ۱۰
- ۵.۱ گونه های شرایط مرزی: بالا راست ویژگی مرزی دوره ای در یک بعد، پایین راست شرایط مرزی که به آن
کانال باریک می گویند، چپ بالا شرایط مرزی دوره ای در دو بعد و چپ پایین شرایط مرزی در سه بعد. ۱۱
- ۶.۱ یک حرکت در فضای فاز روی لایه با انرژی ثابت. ۱۴
- ۷.۱ شارش نقاط فضای فاز در زمان، خطوط حرکت در فضای فاز با هم برخورد نمی کنند. ۱۵
- ۸.۱ نتایج آزمایش های پراکندگی نوترون برای تابع توزیع شعاعی در نزدیکی نقطه سه گانه. ۲۱
- ۱۰.۲ فیلمی از بسپار که آزمایش گروه وی در آن انجام شده [۱۰]. در نمودار B تصویر میکروسکپ اپتیک از
ذرات در کانال دایره ای شکل دیده می شود. ۲۹
- ۲.۲ نمودار A مسیر هشت ذره کنار هم. این تصاویر با بکار بردن روش پردازش تصویر گرفته شده گرفته شده
است. پیش از گرفتن این تصاویر چهار ساعت زمان برای به تعادل رسیدن سامانه گرفته شده است. نمودار
B نمودار $\log - \log$ از ماینگین مربع جابجایی برای پنج اندازه گوناگون قدرت برخورد. خط ها از
بالا به پایین مربوط به قدرت برخورد بیشتر هستند [۱۰]. ۳۰
- ۳.۲ نمودار تابع توزیع در مقاله وی. این تابع یا ضرب در $t^{\frac{1}{4}}$ بهنجا شده است. خط پررنگ برازش گاوسی
است [۱۰]. ۳۱
- ۴.۲ تابع تحرک پذیری تک ذره بر حسب قدرت برخورد در مقاله وی [۱۰]. ۳۱
- ۵.۲ مقایسه میان نتیجه شبیه سازی و عبارت دقیق در مقاله بیشاپ و برن [۳۵]. ۳۲
- ۶.۲ مدلی که در پژوهش گروه امبیورسون بکار رفته است [۱۱]. ۳۴
- ۷.۲ مسیر حرکت ذرات در جعبه. اندازه ها با بخش بر L [۱۱]. ۳۴
- ۸.۲ تابع PDF برای ذره میانی و ذره کناری در زمان های گوناگون در مقاله امبیورسن [۱۱]. ۳۴
- ۹.۲ نمودار چگالی احتمال تعادلی و همسنجی آن با نتایج ذرات نقطه ای بدون حجم در مقاله امبیورسن. ۳۵
- ۱۰.۲ میانگین مربع جابجایی برای سه چگالی گوناگون. خطوط ممتد محاسبات عددی بر پایه محاسبات این مقاله
و خطوط مستقیم نتایج تقریبی در رژیم های یک تا سه است. ۳۵
- ۱۱.۲ یک پیکر بندی نوعی از سامانه یک بعدی. میله ها نمی توانند از روی هم رد شوند. در شکل بالا شرایط
مرزی دوره ای را داریم که میله های رنگ روشن تر یک میله اند! در شکل پایین شرایط مرزی بازتابی نشان
داده شده است [۱۸]. ۳۵
- ۱۲.۲ مسیر دو ذره نوعی (بیستم و بیست و دوم) ۴۰

- ۱۳.۲ پیکر بندی نوعی میله ها در سه چگال گوناگون ۴۰
- ۱۴.۲ تابع توزیع فاصله ای در سه چگالی گوناگون. ۴۲
- ۱۵.۲ تابع ساختار در سه چگالی گوناگون. ۴۲
- ۱۶.۲ هر میله نوعی کمترین فاصله با میله یک را در هنگامی دارد که همه میله های پیشین به هم چسبیده باشند و بیشترین فاصله را هنگامی دارد که به میله جلویی بچسبند [۱۹] ۴۵
- ۱۷.۲ نمونه از نتایج تحلیلی اندازه میانگین مربع جابجایی. محور افقی شماره ذره و محور عمودی اندازه میانگین مربع جابجایی را نشان می دهد. شمار ذرات ۲۰۰ است. ۵۲
- ۱۸.۲ تابع توزیع فاصله ای در سه چگالی گوناگون. ۵۸
- ۱۹.۲ تابع ساختار ایستایی برای سه چگالی گوناگون. ۵۸
- ۲۰.۲ تابع ساختار ایستایی برای سه چگالی گوناگون. ۵۹
- ۲۱.۲ میانگین مربع جابجایی برای کسر پکش های گوناگون. شرایط مرزی دوره ای است، شمار ذرات ۱۰۰۰ و هر ذره بگونه میانگین دو میلیون برخورد انجام داده است. ۵۹
- ۲۲.۲ میانگین مربع جابجایی برای کسر پکش های گوناگون. شرایط مرزی بسته است، شمار ذرات ۲۰۰ و هر ذره بگونه میانگین یک میلیون برخورد انجام داده است. ۶۰
- ۲۳.۲ میانگین مربع جابجایی برای کسر پکش های گوناگون. شرایط مرزی دوره ای است، شمار ذرات ۱۰۰۰ و هر ذره بگونه میانگین دو میلیون برخورد انجام داده است. ۶۰
- ۲۴.۲ میانگین مربع جابجایی برای کسر پکش های گوناگون. شرایط مرزی دوره ای است، شمار ذرات ۲۰۰ و هر ذره بگونه میانگین یک میلیون برخورد انجام داده است. ۶۱
- ۲۵.۲ میانگین مربع جابجایی برای کسر پکش های گوناگون. شرایط مرزی دوره ای است، شمار ذرات ۱۰۰۰ و هر ذره بگونه میانگین دو میلیون برخورد انجام داده است. ۶۱
- ۲۶.۲ میانگین مربع جابجایی برای $s = 10$ و $s = 100$ پارامتر های شبیه سازی همانند نمودار های پیش است. ۶۲
- ۲۷.۲ رفتار میانگین مربع جابجایی برای سه چگالی گوناگون و دو اندازه ناخالصی گوناگون در زمان های کم. همانگونه که دیده می شود اندازه آنها با هم تفاوت دارند. ۶۲
- ۲۸.۲ رفتار میانگین مربع جابجایی برای چند چگالی و چند اندازه ناخالصی گوناگون در زمان های طولانی. می بینیم که در کران زمان بی نهایت اندازه میانگین مربع جابجایی برای دو اندازه ناخالصی که اختلاف زیادی با هم دارند با هم یکی می شوند. ۶۳
- ۲۹.۲ میانگین مربع جابجایی برای سه چگالی و دو اندازه ناخالصی گوناگون اما این بار با شمار ذرات ۵۰۰. همانگونه که دیده می شود افت خیز ها همچنان وجود دارند. ۶۴
- ۱.۳ مدلی که کاردر بررسی کرده است. ۶۶
- ۲.۳ نموداری کمترین فاصله میان میله ها بر حسب زاویه دو میله. هر چه رنگ تیره تر است فاصله نسبی کمتر است. ۶۷
- ۳.۳ مقاله کاردر نمودار ۳: محور افقی فشار در یکا های کاهش یافته است و محور عمودی نیز میانگین انرژی آزاد گیبس بر ذره در یکا های کاهش یافته است. نمودار پایین همین کمیت برای ذرات بدون بر همکنش (بدون بعد) است. ۶۸

- ۴.۳ خطوط رنگی (کمرنگتر) میانگین فاصله میان ذرات a در یکای l بعنوان تابعی از f کشیده شده است. خط پایینی یک گاز آرمانی است و برای همسنجی با نتیجه ای که از بسط ویربال بدست آورديم (خط بالایی) آورده شده است. خط چین نتیجه ای است که از ماتریس انتقال برای ضریب کشسانی بدست می آید. دایره های توپر رابطه میان a و f بدست آمده از شبیه سازی و مربع های توپر نتایج شبیه سازی برای ضریب کشسانی است. ۶۹
- ۵.۳ چند گونه از مدل های ذرات در راستای یک خط. خطوط افقی محوری هستند که مولکولها روی آن حرکت می کنند. نمودار a سوزن (میله) ها، نمودار b چهارگوش، c بیضی گون و d زاویه همه آنها با خط عمود بر محور محاسبه شده. ۶۹
- ۶.۳ برخورد میان دو میله در دو بعد. ۷۰
- ۷.۳ مسیر یک ذره نوعی در سامانه دو بعدی. ۷۰
- ۸.۳ نمودار سری زمانی نسبت مجموع انرژی جنبشی انتقالی به چرخشی. ۷۱
- ۹.۳ نمودار فشار سامانه در یکا های کاهش یافته. فشار بر حسب چگالی خطی است. خط کشیده شده تنها برای راهنمایی چشمی است. ۷۱
- ۱۰.۳ بستگی پخش زاویه ای : D_{rot} به چگالی، خط برای راهنمایی چشمی است. ۷۱
- ۱۱.۳ یک پیکر بندی نوعی از سامانه یک بعدی. میله ها نمی توانند از روی هم رد شوند. در شرایط مرزی دوره ای میله انتهایی می تواند با میله نخستین برخورد کند. ۷۲
- ۱۲.۳ هشت حالت ممکن برخورد دو میله. در چهار تایی نخست نقطه برخورد x^* و y^* در بالای محور و چهار تایی دیگر نقطه برخورد در پایین محور است. ۷۴
- ۱۳.۳ یک نمونه از شکل تابع زمان برخورد. هنگامی که یکی از این تابع ها صفر می شود یکی از سرهای یکی از میله ها در امتداد میله دیگر قرار گرفته است. ۷۶
- ۱۴.۳ در شکل نخست میله یک از راستای میله دوم گذشته. در نمودار دوم میله دو از میله یک گذشته اما تنها هنگامی همپوشانی رخ می دهد که هر دو رویداد با هم رخ دهند. ۷۶
- ۱۵.۳ حالت برخورد در بالا. ۷۷
- ۱۶.۳ حالت برخورد در پایین. ۸۰
- ۱۷.۳ حالت برخورد سوم. ۸۳
- ۱۸.۳ حالت برخورد چهارم. مانند حالت برخورد نخست است ولی جای برخورد کنند و برخورد شونده عوض شده است. ۸۵
- ۱۹.۳ حالت برخورد پنجم. مانند حالت برخورد نخست است ولی جای برخورد کنند و برخورد شونده عوض شده است. ۸۷
- ۲۰.۳ حالت برخورد ششم. مانند حالت برخورد نخست است ولی جای برخورد کنند و برخورد شونده عوض شده است. ۸۸
- ۲۱.۳ مانند حالت برخورد دوم است ولی جای برخورد کنند و برخورد شونده عوض شده است. ۹۰
- ۲۲.۳ حالت برخورد هشتم. مانند حالت برخورد نخست است ولی جای برخورد کنند و برخورد شونده عوض شده است. ۹۲
- ۲۳.۳ مکان یک ذره نوعی در گذر زمان. ۹۴
- ۲۴.۳ توزیع سرعت های خطی پس از رسیدن به تعادل. ۹۴
- ۲۵.۳ تابع توزیع سرعت زاویه ای. ۹۴
- ۲۶.۳ نسبت مجموع انرژی جنبشی تراپردی به مجموع انرژی جنبشی چرخشی. ۹۵
- ۲۷.۳ تابع ساختار ایستایی برای چند چگالی. ۹۵

۹۶	۲۸.۳	نمودار بسامد برخورد برحسب چگالی.
۹۶	۲۹.۳	تابع توزیع شعاعی برای سه چگالی گوناگون
۹۶	۳۰.۳	تابع $g_2(r)$ برای سه چگالی گوناگون.
۹۷	۳۱.۳	میانگین مربع جابجایی.
۹۷	۳۲.۳	میانگین مربع چرخش زاویه ای.
۹۸	۳۳.۳	پارامتر نظم بر حسب چگالی.
۹۸	۳۴.۳	تابع خود هم بستگی سرعت خطی برای چند چگالی.
۹۸	۳۵.۳	تابع خود هم بستگی سرعت زاویه ای برای چند چگالی.

لیست جداول

۱.۱ آزمون کلاسیک بودن رفتار مواد [۲۳] ۴

فصل ۱

آشنایی آغازین، مکانیک آماری و کمیت هایی که باید به دست آیند

۱.۱ درباره شبیه سازی

۱.۱.۱ سامانه، مدل و شبیه سازی

به بخشی از جهان فیزیکی که به آن می‌نگریم سامانه می‌گوییم. سامانه می‌تواند از شمار زیادی از ذره‌های همانند و یا نا همانند ساخته شده باشد. و وضعیت ذره‌ها حالت همه سامانه را بدست می‌دهد. برای نمونه هنگامی که همه ی مکان‌ها و اندازه حرکت‌های 10^{24} ذره از سامانه‌ای دانسته شود، حالت همه سامانه دانسته می‌شود و می‌توان دیده پذیرهایی (مشاهده پذیرهایی) مانند فشار و دما را اندازه گرفت. طبیعی است که ما نمی‌توانیم همیشه همه سامانه را ببینیم، بجای آن برای کاوش در سامانه به بررسی و کنترل دیده پذیرها می‌پردازیم. برای قانون گاز آرمانی فرض می‌کنیم:

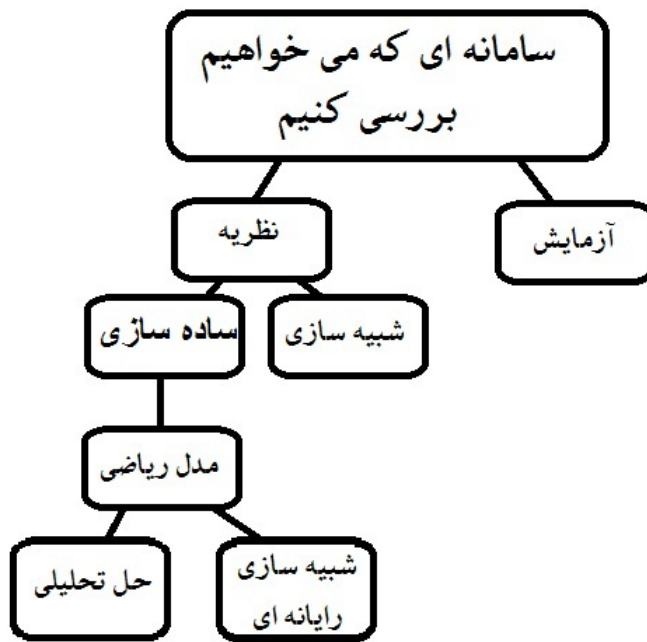
$$PV = NkT \quad (1.1)$$

در گام پس از آن به دنبال نظریاتی برای پیوند میان دیده پذیرها و حالت‌های درونی سامانه‌ها هستیم. برای رسیدن به این خواسته دو راه هست: نخست، دادن نظریات رده بالاتر و دوم انجام شبیه سازی. نظریات رده بالا تر مانند مکانیک آماری تلاش می‌کنند دشواری‌های محاسبات را با کم کردن ریزه کاری‌های حالات از میان ببرد. مکانیک آماری حالت درونی سامانه را نمی‌داند بلکه احتمال بودن سامانه را در حالت ویژه‌ای می‌دهد. راه دیگر دینامیک مولکولی است که بیشتر حرکت همه ذره‌ها را بررسی می‌کند. یعنی دینامیک مولکولی سرراست و کمتر فلسفی است که درباره آن پرمایه گفتار خواهیم کرد. اگر بخواهیم سامانه را بگونه نظری یا آزمایشگاهی بررسی کنیم روش یکتاست: دیده پذیر ویژه‌ای را کنترل می‌کنیم و با دیدن باز خورد سامانه دیده پذیرهای دیگر را اندازه گیری یا حساب می‌کنیم. هدف کارهای نظری پیوند میان خروجی‌هایی که می‌توان اندازه گرفت و ورودی‌های پایش شده است. برای این خواسته نخست از سامانه الگوی سازی می‌کنیم. مدل سازی می‌تواند در هر گامی انجام شود. یک مدل درست آن است که هنگامی که زیر سامانه را شبیه الگو فرض می‌کنیم، رفتاری که دوست داریم ببینیم تغییر نکند.

در این رده، شبیه سازی راه تازه‌ای برای انجام پژوهش است. شبیه سازی در رده‌های پایین تر همچون ابزاری برای ساده سازی بکار برده می‌شود. دو کاربرد برای شبیه سازی پیشنهاد می‌شود:

۱. داده‌های شبیه سازی روی مدل می‌توانند برای آزمایش درستی نظریه بکار برده شوند

۲. داده‌های شبیه سازی می‌توانند با آزمایش همسنجی (مقایسه) شوند تا ببینیم مدل شبیه سازی درست است یا نه



شکل ۱.۱: روش های پژوهش: باید دانست که سامانه ای که می خواهیم بررسی کنیم می تواند حقیقی یا خود الگوی از آن باشد [۱۹].

۲.۱.۱ مدل هایی برای شبیه سازی

برای مدل های شبیه سازی می توان نمودار زیر را کشید:

مدل شبیه سازی = مدل برای بر هم کنش ذره ها + مدل برای بر هم کنش سامانه با پیرامون

بر هم کنش میان ذره ها را بصورت زیر می گیریم:

$$\sum_i \sum_{<j} u(r_{ij}) \quad (2.1)$$

که $u(r_{ij})$ تابع انرژی پتانسیل جفتی است که شکل آن را میدانیم و r_{ij} جدایی میان دو ذره i و j است. نیروی میان دو ذره با $F_i = -\frac{\partial u(r)}{\partial r_i}$ داده می شود که در آن عملگر گرادیان است. بخش دوم الگوی شبیه سازی وابسته به ویژگی های مرزی است که می گوید چگونه ذره ها با پیرامون خود بر هم کنش می کنند.

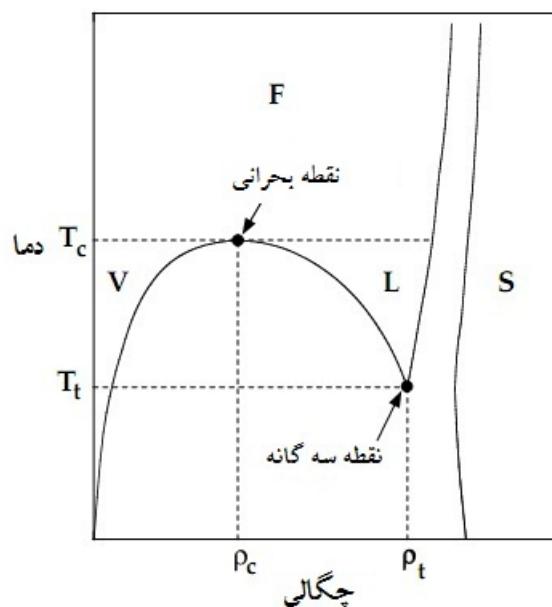
۳.۱.۱ احتمال در برابر تعیین

یک شبیه سازی در اندازه مولکولی دارای سه گام است:

۱. ایجاد مدل

۲. بدست آوردن راهگذر(مسیر) ذره ها

۳. یافتن ویژگی هایی که می خواهیم



شکل ۲.۱: نموداری از یک گاز تک اتمی که نشان دهنده ی مرز ها میان مایع L، جامد S و بخار V [۲۳].

گام دوم به روش های گوناگونی انجام می پذیرد. در روش دینامیک مولکولی جای ذره ها از برابری دیفرانسیل نیرو و بدست می آید. در روش مونت کارلو با به کار بردن پتانسیل، "احتمالی" برای جای ذره ها گمان برده می شود و حرکت با یک احتمال کاتوره ای بدست می آید که در بخش ۴.۱ درباره آن خواهیم گفت. شبیه سازی ها ممکن است دارای خطاهای زیادی باشند:

- اطمینان نداشتن از رسیدن سامانه به تعادل یا یک حالت پایا
- خطاهای آماری در کشیدن نمودار ها
- خطاهای عددی در الگوریتم ها
- و خطاهای ناشی از کوچک بودن جعبه شبیه سازی

اگر داده های بدست آمده از شبیه سازی پیرامون اندازه های ویژه ای افت و خیز داشته باشد شبیه سازی ارزشمند خواهد بود. برای اطمینان از درست بودن شبیه سازی می توان با داده های آزمایشگاهی همسنجی (مقایسه) کرد. اندازه دقت شبیه سازی همانند آزمایش است که باید این پرسش ها را برای بررسی پرسید که ریشه بی دقتی ها چه هستند؟ آیا نمونه دیگری می تواند جایگزین شود؟ آیا نمونه های پیروز (موفق) همبسته هستند؟ آیا دستاورد ها را می توان باز تولید کرد؟ آیا دستاورد ها با دستاورد های پیشین سازگارند؟ و ...

۴.۱.۱ مروری بر حالت مایع

گونه شهودی مایع حالتی میان گاز و جامد است. از این رو آغاز گفتگو درباره ویژگی های هر ماده، پیوند میان فشار P، چگالی عددی ρ و دما T در فاز های گوناگون است.

در نمودار ۲.۱ ناحیه ی بودن مایع، در زیر نقطه سه گانه و بالای نقطه آشفستگی (بحرانی) است. از بسیاری از دیدگاه ها ویژگی های شاره ی چگال پسا آشفته با مایع بسیار متفاوت است. برای سامانه های اتمی اینکه نظریات کلاسیکی پذیرفتنی هستند یا نه را با به کار بردن رابطه زیر در می یابیم:

$$\Lambda = \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.1)$$

مایع	T_t/K	$\Lambda/\text{\AA}$	Λ/a	Θ_{rot}/T_t
H ₂	14.1	3.3	0.97	6.1
CH ₄	91	0.46	0.12	0.083
Li	454	0.31	0.11	
Ar	84	0.30	0.083	
HCl	159	0.23	0.063	0.094

جدول ۱.۱: آزمودن کلاسیک بودن رفتار مواد [۲۳]

که در آن m جرم اتم و $\beta = \frac{1}{k_B T}$ است. برای رفتار کلاسیکی باید Λ بسیار کوچک تر از a باشد که $a \approx \rho^{-\frac{1}{3}}$ چگالی (است) میانگین نزدیک ترین فاصله میان دو اتم است. در مورد مولکولها همچنین باید به یاد داشته باشیم $\theta_{rot} < T$ که $\theta_{rot} = \frac{\hbar^2}{2Ik_B}$ دمای مشخصه است (I لختی چرخشی مولکولی است). در تقریب کلاسیکی می توان بخشی که برای حرکت گرمایی است را از بخشی که به برهم کنش میان ذره ها است جدا کرد. سرانجام این کار توانایی ما در جدا کردن بخش جنبشی از پتانسیل است. اگر V_N همه انرژی پتانسیل سامانه باشد که N شمار مولکولها است و K_N کل انرژی جنبشی باشد، مایع هنگامی که $\frac{K_N}{V_N} \approx 1$ باشد. $\frac{K_N}{V_N} \gg 1$ برای گازهای رقیق و $\frac{K_N}{V_N} \ll 1$ برای جامد های کم فشار است. به جای آن اگر سامانه را با درازای σ و انرژی ϵ که بگونه تقریبی با مرزها و میزان نیروهای میان مولکولی پیوند دارند نشان میدهم، در می یابیم که در ناحیه مایع در نمودار فاز، چگالی عددی یافته $\rho^* = \frac{N\sigma^3}{V}$ و دمای کاهش یافته $T^* = \frac{k_B T}{\epsilon}$ هر دو نزدیک به یک هستند. مایع ها و شاره های چگال همچنین با بیشتر مهم بودن نیروهای برخوردی و کوتاه برد و همچنین همبستگی مکانی از هم باز شناخته می شوند. همچنین تفاوت شاره ها به جامد ها با نبود نظم بلند برد روشن می شوند. ساختار آنها در بسیاری جاها پیامد حجم واگذار شده^۱ است که با پکیدگی ذره های مغز سخت پیوند دارد. برخی از ویژگی های مایع های تک اتمی (آرگون)، یک مایع مولکولی (نیتروژن) و یک فلز مایع در جدول ۱-۲ نشان داده شده است. برخی ویژگی های فلزهای مایع در مواردی بسیار با دیگر سامانه ها متفاوت هستند مانند: فشردگی هم دما، کشش سطحی، گرمای تبخیر و نسبت دمای نقطه آشفستگی (بحرانی) به دمای نقطه سه گانه.

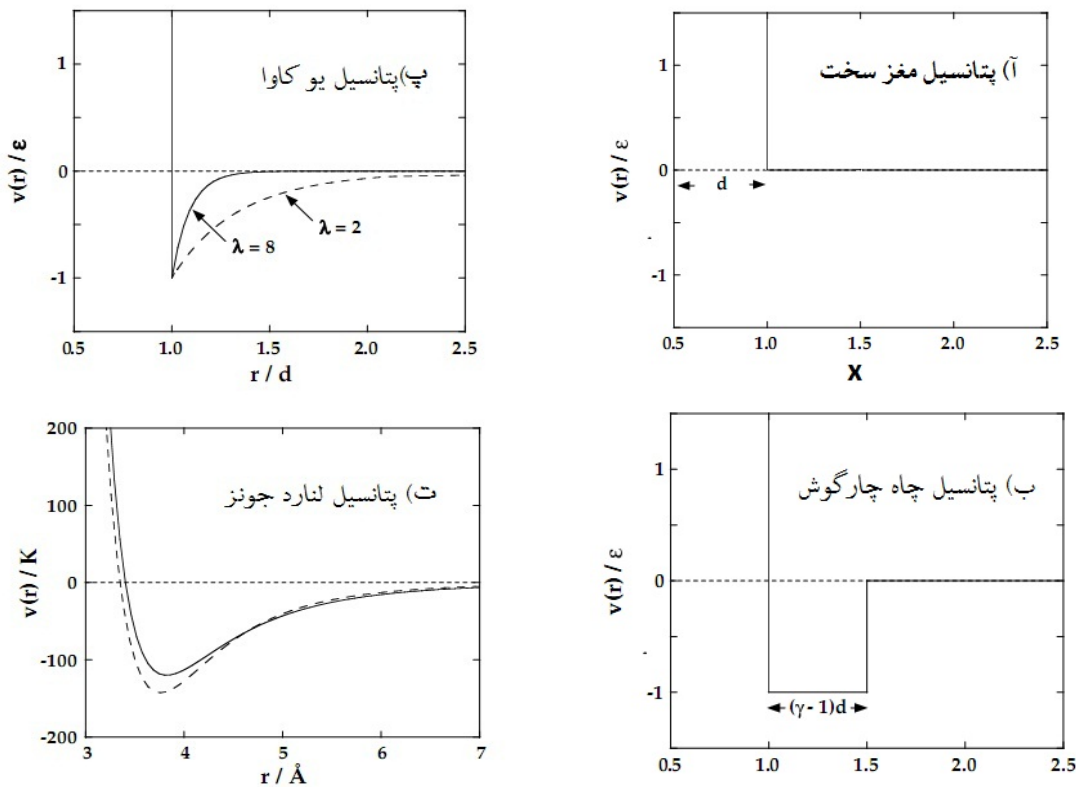
۵.۱.۱ نیروهای میان مولکولی

مهمترین ویژگی پتانسیل های میان مولکولی نیروی پس زنی است که در جدایی های بسیار کم دو اتم یا مولکول بدلیل همپوشانی بیرونی ترین لایه های الکترونی آنان است. اثر این پس زنی درست کردن نظم کوتاه برد است که از ویژگی های مایع است. نیروی کششی در جدایی زیاد اثر می کند، خیلی آشکارتر با جدایی میان ذره ها تغییر می شود و تنها نقش کوچکی در درست کردن ساختار مایع بازی می کند. ولی به جای آن زمینه کشش عمومی را فراهم کرده و سبب بیشتر شدن انرژی بستگی می شود که برای پایدار بودن حالت مایع نیاز است. جدایی میان کارایی نیروی کشش و رانشی بینشی است که مدت ها پیش ثابت شده است و در دل اندیشه های واندروالس پنهان است و پایه بسیاری از نظریه های اختلال در مایعات است. مدل ساده از شاره ها، سامانه ای از گوی های سخت است که پتانسیل جفت ذره ها بگونه زیر است:

$$v(r) = \begin{cases} \infty & r < d \\ \text{صفر} & r > d \end{cases} \quad (۴.۱)$$

که در این رابطه d قطر گوی سخت است. این پتانسیل ساده برای اندیشیدن درباره پدیده هایی که بخش مغز سخت پتانسیل برتری دارد مناسب است. بیشتر دانسته های ما درباره پتانسیل سخت از شبیه سازی های رایانه ای بدست می آید. چنین

^۱excluded volume



شکل ۳.۱: گونه های پتانسیل میان ذرات یک مایع [۲۳].

محاسباتی به روشنی نشان داده اند که ساختار شاره های مغز سخت دست کم در زمانی نزدیک به بلوری شدن تفاوت معنی داری با ساختار هایی که پتانسیل پیچیده تر دارند، ندارد. این مدل تا اندازه ای با ویژگی های فیزیکی پیوند هایی دارد. برای نمونه برابری حالت اسمتیک گوی ها در اندازه میکرون سیلیکا در حلال آلی بدست پتانسیل های مغز سخت با کشش توان دو بدست می آیند (همانگونه که در نمودار ۴.۲ می بینیم). به هر روی با اینکه شبیه سازی شاره مغز سخت یک انجماد را در $\rho^* (= \rho d^3) \approx 0.945$ نشان می دهد نبود نیروی کششی تنها یک فاز شاره ای را نشان می دهد. پتانسیل دیگری که بتواند برای توصیف یک مایع حقیقی بکار رود با ترکیب پتانسیل مغز سخت با یک چاه کششی چارگوش ترکیب می شود. این پتانسیل دو پارامتر را به مسئله می افزاید: ϵ ژرفای چاه و $(\gamma - 1)$ پهناي چاه در یکای d است. که بیشتر زمان ها نزدیک به ۱.۵ است (نمودار ۴.۲ ب). جایگزینی برای چاه پتانسیل، پتانسیل یوکاوا^۲ است که اینگونه شناخته می شود:

$$v(r) = \begin{cases} \infty & r^* < 1 \\ -\frac{\epsilon}{r} \exp[-\lambda(r^* - 1)] & r^* > 1 \end{cases} \quad (5.1)$$

که $r^* = \frac{r}{d}$ و وارون λ دنباله بخش جذب کننده پتانسیل را نشان می دهد. وقتی فاصله میان دو ذره زیاد باشد جملات مانند r^{-6} و r^{-8} و r^{-10} هستند نیز پدیدار می شوند. در برد کوتاه نیز پتانسیل می تواند بگونه نمایی با $\exp(-r/r_0)$ توصیف شود که r_0 پارامتری از جنس طول در سامانه است. یکی دیگر از پتانسیل های گمانه زده شده پتانسیل آشنای ۶-۱۲ لnard جونز^۳ است که هم برد بلند و هم برد کوتاه را در بر می گیرد:

$$v(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (6.1)$$

^۲Youkawa

^۳Lennard-jones

این پتانسیل دارای دو پارامتر است: پهنای بر خورد σ و ε ژرفای پتانسیل در کمینه $v(r)$ است. پتانسیل لنارد جونز نمایش خوبی از بر هم کنش میان اتم ها در گاز های رقیق و مولکولهای گوی مانند می دهد. شبیه سازی رایانه ای نشان داده است که نقطه سه گانه در این پتانسیل در $\rho^* \approx 0.85$ و $T^* \approx 0.68$ است.

همه روش های گفته شده وابسته به بر خورد دو مولکول تنها است نیرو های چند ذره ای نادیده گرفته شده است. بررسی درستی این نادیده گرفتن دشوار است. برای نمونه در گاز های رقیق بر هم کنش های سه جسمی، پراش سه تایی- دو قطبی مهمترین بر هم کنش های چند ذره ای هستند. برای بررسی ذره های بار دار نیاز به به شمار آوردن نیرو های الکتریکی دو، چند قطبی و نیرو های مغناطیسی نیز هست. کاوش درباره بر هم کنش میان ذره های نا کروی دشواری های بیشتری دارد چرا که افزون بر فاصله میان آنها زاویه نسبی شان نیز مهم است. در باره این مواد بیشتر خواهیم گفت.

۶.۱.۱ روش های آزمایشگاهی

بررسی آزمایشگاهی مواد بسته به اینکه آیا اندازه گیری ها در مقیاس میکروسکوپی یا ماکروسکوپی انجام می شوند به دو گونه کلی دسته بندی می شود. در حالت کلی محاسبه ویژگی های میکروسکوپی حساسیت بیشتری به تقریب هایی که در نظریه زده می شود و به انگاره (فرض) هایی که درباره پتانسیل های جفتی می زنیم دارند. ولی ویژگی های ماکروسکوپی با دقت بسیار بیشتری نسبت به ویژگی های میکروسکوپی اندازه گیری می شوند. و مربوط به برابری حالت هستند. داده های با دقت P ، ρ و T که می توانند با اندازه گیری های گرماسنجی بدست آیند دانسته هایی در باره اندازه های ترمودینامیکی دیگر می دهند. برای بیشتر مایع ها تنها در نزدیکی مرز تعادل مایع-بخار، فشار بسان تابعی از دما و چگالی شناخته می شوند. ولی برای سامانه های ویژه که از دیدگاه نظری مورد نگرش هستند، فشار در دما های بالاتر نیز بدست می آیند.

دسته مهمی از آزمایش های ماکروسکوپی آنانی هستند که به ضرایب گذر پیوند دارند. برای این کار روش های گوناگونی بکار برده می شود. برای نمونه گرانشی برشی می تواند از دید افت و خیز های گشتاوری یا از آزمایش های موینگی بدست آیند. روش سراسر پیدا کردن ضریب خود پخشی در برگیرنده به کار بردن مسیر یاب های پرتوزا می شود که در دسته اندازه گیری های میکروسکوپی جای می گیرد.

مهمترین اندازه گیری های میکروسکوپی دست کم از دید نظری آزمایش های بازتابی پراکندگی است. پراکندگی کشسان نوترون ها یا پرتو X که در آن پراکندگی از رویه برش (سطح مقطع) به عنوان تابعی از ترابرد (انتقال) اندازه حرکت میان پرتو و نمونه، جایی برای افزایش دانش آزمایشگاهی ما از ساختار ایستایی یک شاره است. پراکندگی کشسان رویه برش بسان تابعی هم از ترابرد تکانه و هم انرژی اندازه گیری می شود. اینگونه می شود در باره شبکه و ساختار آگاهی هایی بدست آورد. این روشی بسیار نیرومند در بررسی فرایند های میکروسکوپی وابسته به زمان در مایعات است. آزمایش های پراکندگی نوری دانسته های مشابه را می دهد. ولی کرانه طول موج های در دسترس برای آزمایش را به نزدیک 10^{-5} کم می کند. به هر رو این آزمایش ها ارزش زیادی در بررسی پراکندگی برخوردی در پدیده های آشوبناک دارد.

۲.۱ شبیه سازی به روش دینامیک مولکولی

شبیه سازی دینامیک مولکولی روشی است برای بدست آوردن ویژگی های سامانه کلاسیک بس ذره ای هم در تعادل و هم در هنگام گذار. واژه کلاسیک به این معناست که حرکت ذره ها تشکیل دهنده سامانه بر پایه قوانین مکانیک کلاسیک است. برای نمونه می توان از قانون دوم نیوتن مشتق دوم مکان را بدست آورد:

$$\mathbf{F} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \quad (7.1)$$

این تقریب خوبی برای گستره بالایی از مواد است. شبیه سازی دینامیک مولکولی از خیلی دیدگاه ها بسیار مانند آزمایش واقعی است. در شبیه سازی دینامیک مولکولی ما یک نمونه آماده می کنیم که الگویی از N ذره است و معادلات حرکت این سامانه را حل می کنیم تا زمانی که برخی ویژگی های سامانه در زمان تغییر نکنند (رسیدن به تعادل). پس از آن محاسبات را انجام