

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة محمد بوضياف - المسيلة



ميدان: علوم المادة
فرع: الفيزياء.
تخصص: الفيزياء النظرية

كلية: العلوم.
قسم: الفيزياء.
رقم: Ph/TH/07/2022

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمي

إعداد الطالب: شيكوش منصف

تحت عنوان :

تحديد الخواص الفيزيائية الحرارية للغازات أحادية الذرة
تتكون من غازات نادرة

تمت المناقشة يوم 20 / 06 / 2022 أمام اللجنة المكونة من:

رئيسا	جامعة المسيلة	أ. د. رضوان صلاح أسماء
مشرفا ومقررا	جامعة المسيلة	د. بوشلاغم فوزية
مناقشا	جامعة المسيلة	د. نحاوة سمراء

السنة الجامعية: 2022/2021

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

الشكر و الإهداء

الحمد لله والصلاة والسلام على رسول الله، لا يسعني في هذا المقام وبعد إتمام المذكرة إلا أن أتقدم بخالص الشكر إلى الوالدين الكريمين وأخي والعائلة الفاضلة وإلى الأستاذة المشرفة بوشلاغم فوزية نظير جهودها الكبيرة من أجل إتمام هذه المذكرة.

كما أتقدم بالشكر الخالص للأستاذة رضوان صالح أسماء والأستاذة نحاوة سمراء على قبولهم مناقشة هذه المذكرة، وأيضا الشكر الموصول لإدارة قسم الفيزياء ولكل من قدم لي يد العون من أجل إنجاز هذا العمل من قريب أو بعيد وأخص بالذكر الطالب لقراب صدام.

الفهرس

11	مقدمة عامة	
الفصل الأول: المفاهيم العامة حول الاصطدام الذري		
14	المقدمة	1
14	نظرية التصادمات الثنائية	1.1
15	التصادم الكمي	1.1.1
17	مفهوم المقطع الفعال (section efficace)	2.1.1
20	الموجات الجزيئية	3.1.1
21	فرق الطور	4.1.1
23	التقريب الشبه الكلاسيكي	5.1.1
23	الجسيمات المتطابقة	2.1
24	إشعاعات التناظر	1.2.1
27	الحد الكلاسيكي	2.2.1
الفصل الثاني: تصادم ذرة ارغون-ارغون (Ar-Ar)		
30	مقدمة عامة	2
30	أساسيات الكمون	1.2
30	المسافات المتوسطة	1.1.2
30	المسافات الكبيرة	2.1.2
31	المسافات القصيرة	3.1.2
31	كمون الثنائيات الأرغون	2.2
32	البناء	1.2.2
34	النتائج	2.2.2
35	حساب الطور	3.2
36	المعاملات من الدرجة الثانية لفيرال (Seconds coefficients du virile)	4.2
36	تعريف عام	1.4.2
37	أ. درجة حرارة بويل	
38	ب. التصحيحات الكمية	
38	ت. الكمون التحليلي	
42	التطبيق	2.4.2

الفصل الثالث: الخصائص الحرارية لتصادم ذرة ارغون-ارغون

3.	الخصائص الحرارية لتصادم ذرة ارغون-ارغون.....	46
1.3	حركية الغاز.....	46
2.3	النشر الذاتي.....	48
3.3	اللزوجة والناقلية الحرارية.....	51
	الملحق أ: معادلة بولتزمان.....	57
	الملحق ب: المقطع الفعال التفاضلي مع التناظر.....	58
	الخاتمة.....	60
	قائمة المراجع.....	61
	الملخص.....	64

قائمة الجداول

الجدول 2.1: يمثل قيم الطاقة الكامنة (كمون) $V(R)$ لتصادم $Ar(1s) + Ar(1s)$ بدلالة المسافة R

الجدول 2.2: يمثل قيم المعاملات C_6, C_8, C_{10} والتي تقاس بوحدة الكتلة $(u.a)$ من أجل نظام تصادم

$Ar(1s) + Ar(1s)$ ، القيم التي استعملناها في الحساب هي [13]

الجدول 2.3: خصائص كمون التفاعل للثنائيات $Ar(1s) + Ar(1s)$

الجدول 2.4: يمثل قيم الجزء نصف كلاسيكي L_{sc} الموافق لقيم الطاقة المحصورة ما بين 10^{-4} و

10^{-2}

الجدول 2.5: يمثل هذا الجدول قيم معاملات الدرجة الثانية لفريال ب $cm^3 mol^{-1}$ لغاز الأرجون

^{40}Ar بدلالة درجة الحرارة، النتائج مقارنة مع قيم Eckhard Vogel [21].

الجدول 3.1: يمثل قيم معامل الانتشار $D(T)$ في مجال درجات الحرارة، النتائج مقارنة مع Bo Song

et al [27].

الجدول 3.2: يمثل قيم اللزوجة η بدلالة درجة الحرارة T

الجدول 3.3: يمثل قيم الناقلية الحرارية λ بدلالة درجة الحرارة $T(K)$ لغاز الأرجون ^{40}Ar

قائمة الأشكال

- الشكل 1.1: تصادم ذرة-ذرة في نظام مخبري
- الشكل 1.2: التيارات القادمة والصادرة في ميكانيك الكم
- الشكل 2.1: يمثل منحنى الطاقة الكامنة لـ Ar بدلالة المسافات
- الشكل 2.2: يمثل حساب الطور عند الطاقة $E = 0.01 \text{ u.a}$ لغاز الأروغون ^{40}Ar
- الشكل 2.3: يمثل كمون المجال الصعب
- الشكل 2.4: يمثل كمون البئر المربع
- الشكل 2.5: التمثيل التخطيطي لكمون لرونند-جوننس.
- الشكل 2.6: يمثل معاملات من الدرجة الثانية لفريال بدلالة درجة الحرارة
- الشكل 3.1: يمثل منحنى معامل الانتشار الحراري $D(T)$ بدلالة درجة الحرارة $T(k)$ لغاز الأروغون ^{40}Ar
- الشكل 3.2: يمثل قيم اللزوجة η بدلالة درجة الحرارة $T(k)$
- الشكل 3.3: يمثل منحنى الناقلية الحرارية بدلالة درجة الحرارة $T(K)$.

مقدمة عامة

مقدمة عامة:

منذ الجمع بين ميكانيك الكم والفيزياء الإحصائية والذي يعود فضله إلى العلماء تشابمان وكولينغ وهيرشفلد [1،2] تم تكريس جهود كبيرة سواء على الجانبين النظري والتجريبي لدراسة حركية الغازات وخليطها، وقد كشف هذا المزيج بطريقة نظرية بحتة عن الترابط المباشر القائم بين الخصائص المجهرية سواء المقاسة أو المحسوبة والخصائص الكيميائية لغاز ما.

إن نموذج تشابمان-إنسكوغ [1،2] المقترح عام 1920 لتكامل معادلة بولتزمان هي مثال جيد لنجاح هذا النهج في الواقع، تمكن هذا النموذج من إقامة علاقات رياضية بسيطة بين التفاعلات السائدة على المستوى المجهرى بين مختلف المكونات سواء الذرية أو الجزيئية لغاز الانتشار الحراري واللزوجة. وتمكنت أيضا من تفسير تغير القوانين هذه الخصائص وتأثير الخواص التارموديناميكية (الضغط، الكثافة، درجة الحرارة).

انطلاقا من الخصائص الهيدروديناميكية الترموديناميكية فإنه من الممكن العودة إلى تفاصيل الذرة وفهم القوانين التي تحكم التفاعلات داخل الجزيئات، وقد وجد هذا النهج عدد كبيرا من التطبيقات الفيزيائية الذرية منها والجزيئية، والفيزياء الفلكية والبلازما.

في هذه المذكرة، وضعنا هدفا وهو تحليل بعض الخصائص الفيزيائية الحرارية لغاز الأرغون Ar-Ar مخفف بواسطة نموذج تشابمان-إنسكوغ، والدافع الرئيسي لهذا العمل هو إتاحة كمون (الطاقة الكامنة) دقيقة وحديثة متعلقة بالمركب Ar-Ar، وعلى وجه الخصوص سيعاد النظر في معاملات النقل الحراري عند درجات الحرارة المرتفعة والمنخفضة مع مراعاة التأثيرات النظائرية.

في الفصل الأول من هذه المذكرة، سوف نشرح بإيجاز المفاهيم العامة والأساسية عن الاصطدام الذري، كما سيتناول العرض النظري لحالة اصطدامات بين الذرات المتطابقة.

أما في الفصل الثاني سندرس حالة اصطدام ذرتي الأرغون $Ar(1s) + Ar(1s)$ حيث سيتم إدخال الكمون الميبين في معادلة شرودينغر لنكون قادرين على حلها رقميا بواسطة الحاسوب وباستعمال برنامج الفورترون، كما نقوم بحاسب تحولات الطور ثم استعمال نتائج الحساب الرقمي للكمون لحساب وتحليل علاقتها مع درجة الحرارة.

في الفصل الثالث والأخير نستخدم نتائج حسابات تحولات الطور التي قمنا بحسابها في الفصل الثاني والتي تم الحصول عليها عن طريق تكامل معادلة موجة شرودينغر، من أجل حساب بعض المعاملات الفيزيائية الحرارية (الانتشار الحراري، اللزوجة، الناقلية الحرارية) لنظائر الأرغون، وسيكرس جزء كبير من العمل في هذا الفصل لمعرفة تبيان خصائص النقل الحراري في درجات الحرارة المختلفة.

الفصل الأول

المفاهيم العامة بشأن الاصطدامات الذرية

1. مقدمة:

الاصطدامات الذرية مهمة بشكل أساسي في الفيزياء الذرية والجزيئية، فهي قادرة على وصف ملامح الغازات وخصائصها الهيدروديناميكية بشكل كاف، وهي بذلك مهمة في تفسير بعض الظواهر للفيزياء الفلكية والكيمياء الكمية وفيزياء الليزر والبلازما. وبوجه عام قد تحدث الاصطدامات بين الجسميات الأولية (فوتون، الإلكترون،) والنظام الذري (ذرة، أيون، جزيء) أو بين نظامين ذريين بسيطين ومعقدين، في الفصل الأول نهتم بالاصطدامات المرنة البحتة من نوع (ذرة- ذرة) في الغاز. وكما سنرى لاحقاً في هذه المذكرة يمكن أن تؤدي هذه الاصطدامات إلى خواص فيزيائية حرارية و إلى علاقتها مع ظروف الغاز، مثل تركيب درجة حرارة الغاز وكثافته.

1.1 نظرية التصادمات الثنائية:

النظر في اصطدام جسيم من نوع i مع جسيم آخر من نوع j ، نوضح ذلك في التفاعلين التاليين:

- اصطدام الجسيم i مع الجسيم j بدون تغيير بنية الجسمين الداخلية.

$$i + j \rightarrow i + j$$

في هذه الحالة يسمى التصادم بالتصادم المرن.

- الثاني عندما يحدث تغير في البنية الداخلية لجسمين i و j أثناء التصادم.

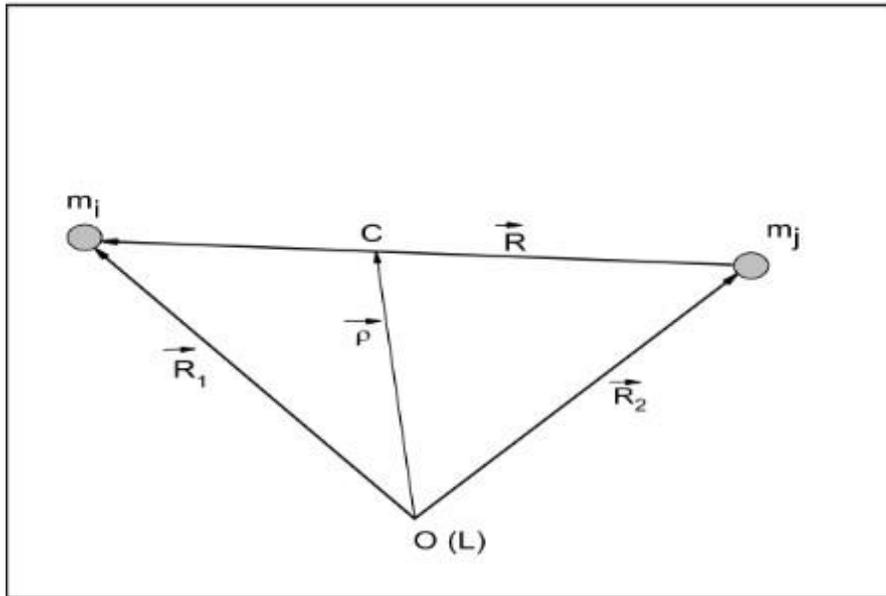
$$i + j \rightarrow i^* + j^*$$

في هذه الحالة يسمى التصادم بالتصادم الغير مرن، يحدث تغير في حالات البنية الداخلية

لجسمين i و j [3].

1.1.1 التصادم الكمي:

يمكن تقليل حركة جزيئين متفاعلين في ميكانيك الكم كما في الميكانيك الكلاسيكية إلى حركة جسيم واحد أو تصادم جسيم الأول كتلته m_1 في الموقع R_1 مع جسيم ثاني كتلته m_2 في الموقع R_2 ويفترض أن هذه النظائر ليست لها هياكل داخلية وأن حركتها غير نسبية كما هو موضح في الشكل 1.1 .



الشكل 1-1: تصادم ذرة - ذرة في نظام مخبري

في هذه الحالة ، من أجل نظام يتكون من ذرتين متصادمتين مع طاقة كلية E_{tot} ، تكتب معادلة شرودينغر كالاتي

$$H\phi(R_1, R_2) = E_{tot}\phi(R_1, R_2) \quad (1.1)$$

دالة موجة عامة لنظام ذرتين و H يمثل هاملتوني معرف بالعبرة التالية.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(R_1, R_2) \quad (1.2)$$

Δ_1 و Δ_2 هما دالتا لابلاس و $V(R_1, R_2)$ هي الطاقة الكامنة لتفاعل بين الذرتين. علاوة على ذلك ، لنفترض أن التفاعل يعتمد على الموضع النسبي.

$$R = R_1 - R_2 \quad (1.3)$$

و على هذا فإن شعاع الموضع \vec{p} متجه نحو مركز الكتلة (C) يتم تعريفه من خلال هذه المعادلة

$$\vec{p} = \frac{m_1\vec{R}_1 + m_2\vec{R}_2}{m_1 + m_2} \quad (1.4)$$

بعد تطبيق بعض التحولات الرياضية على الهاملتوني (1.2) يصبح النظام الهاملتوني بهذا الشكل.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_p - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_R + V(R) \quad (1.5)$$

Δ_ρ و Δ_R هما أوبيراتور لابلاس

الكتلة الكلية : $M = m_1 + m_2$

الكتلة المختزلة بين الذرتين: $\mu = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)}$

ولذلك فإن تطور النظام المعرف بمعادلة شرودينغر يصبح كالتالي

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_\rho - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R + V(R) \right\} \phi(R, \rho) = E_{tot} \phi(R, \rho) \quad (1.6)$$

تكتب عبارة دالة الموجة ϕ على الشكل التالي:

$$\phi(R, \rho) = \varphi(\rho) \psi(R) \quad (1.7)$$

إن دالة الموجة $\varphi(\rho)$ تصف حركة مركز الكتلة للجسيم كما تصف أيضا الحركة الحرة له والذي كتلته هي M ، أما دالة الموجة $\psi(R)$ فهي تصف الحركة النسبية للجسيمين ، وبعبارة أخرى فإنها تصف حركة جسيم كتلته μ وكمونه $V(R)$ ، وهكذا تصبح معادلة شرودينغر بالشكل (1.9)

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_\rho \varphi(\rho) = \epsilon \varphi(\rho) \quad (1.8)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R + V(R) \right\} \psi(R) = E \psi(R) \quad (1.9)$$

تمثل ϵ الطاقة الحركية لجسيم حر كتلته M

إن حلول المعادلة (1.9) مرتبط بانخفاض الطاقة الإيجابية ، وعلى هذا فإن معادلة شرودينغر (1.9) لحركة جسيم في كمون $V(R)$ تكتب بهذا الشكل.

$$\left\{ \Delta_R + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) \right\} \psi(R) = 0 \quad (1.10)$$

$$k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} \quad (1.11)$$

عندما تؤول قيمة $R \rightarrow \infty$ ، يفترض أن تؤول قيمة الكمون $V(R)$ إلى الصفر أكثر سرعة من الكمون الكولومبية $(1/R)$. في هذه الحالة فإن دالة الموجة ψ_k تعطى بشكل مقارب.

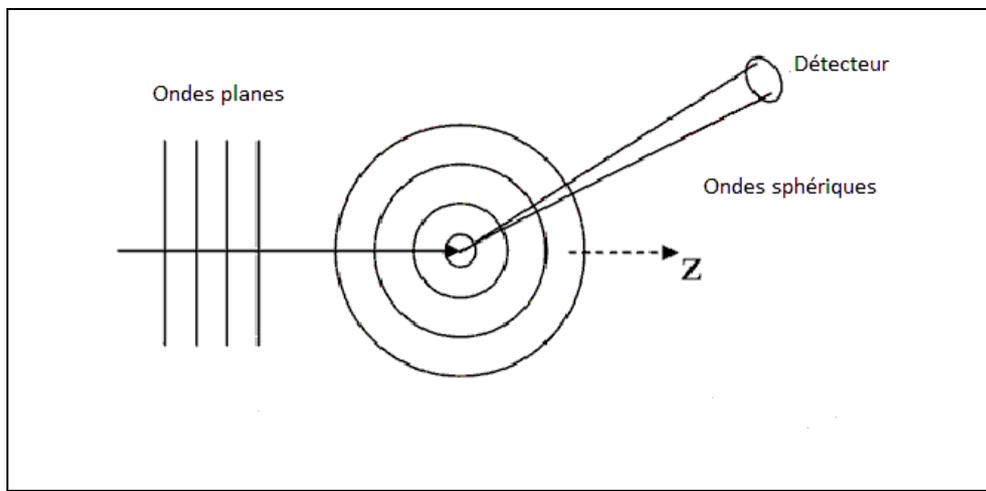
$$\psi_k(R) = \psi_{inc}(R) + \psi_{diff}(R) \quad (1.12)$$

كما هو مبين في الشكل 1-2 ، فإن دالة الموجة ψ_{inc} تمثل الجسيمات الداخلة والتي هي بشكل مسطح، ومع ذلك فإن دالة الموجة ψ_{diff} تمثل الجسيمات المنتشرة (المتصادمة) والتي هي من شكل كروي.

$$\psi_k(R) = N(k) \left[\exp(ikz) + f_k(\theta, \phi) \frac{\exp(ikR)}{R} \right] \quad (1.13)$$

$N(k)$: ثابت التقنين.

$f_k(\theta, \phi)$: سعة الانتشار بدلالة الزاوية القطبية (الإحداثيات القطبية) و الأزموثية.



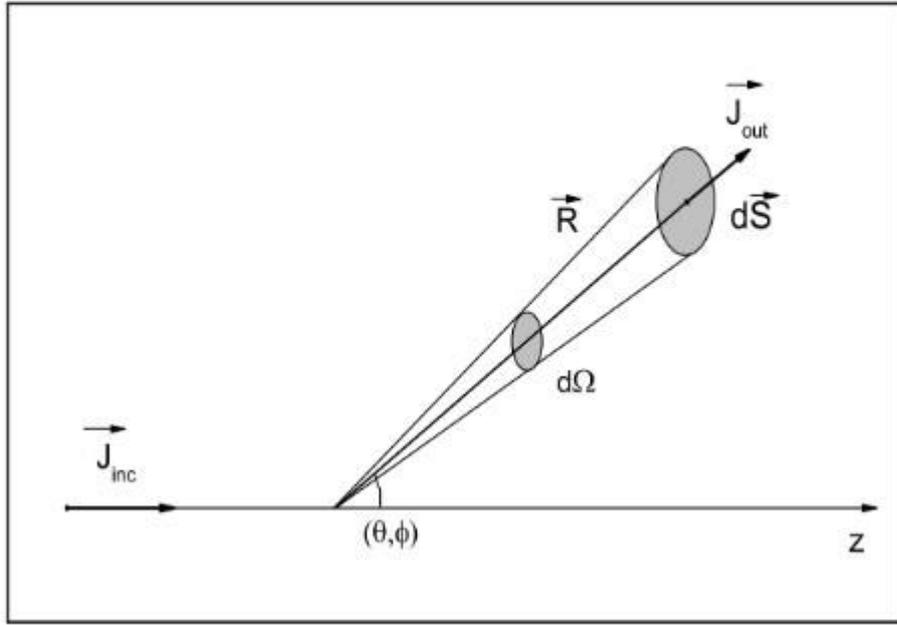
الشكل 1-2 انتشار موجة عرضية بواسطة كمون $V(R)$

2.1.1 مفهوم المقطع الفعال (Section efficace):

من الناحية التطبيقية، تقاس التصادمات المرنة من خلال نسبة الجسيمات المنتشرة في كل وحدة زمنية بزاوية صلبة معينة إلى كثافة تدفق الجسيمات الواردة، و يسمى σ حجم الحيزي المشار إليه و يطلق عليه بالمقطع الفعال [4].

و بصفة عامة، من أجل تقييم انتشار المقطع الفعال، نقوم بحساب موجة الحوادث وموجة الانتشار في التيارات الاحتمالية في حالة الانتشار الثابت، وترد التيارات الواردة والصادرة كما هو موضح في الشكل

1-3



الشكل 1-3 : التيارات القادمة والصادرة في ميكانيك الكم

[4,5]، تعرف عبارة كثافة التدفق بالمعادلة التالية: في ميكانيك الكم

$$J = \frac{\hbar}{2\mu i} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (1.14)$$

سواء كان التدفقات القادمة J_{inc} و الصادرة J_{out} فإن وظائف دالة الموجة المبينة في المعادلة (1.13) تصبح كالتالي:

$$J_{inc} = \frac{\hbar N^2(k)}{\mu} k \quad (1.15)$$

$$J_{out} = \frac{\hbar N^2(k)}{\mu} \mu \left\{ \frac{k}{R^2} |f_k(\theta, \phi)|^2 e_R + \frac{1}{R^3} \text{Im} \left[f_k^*(\theta, \phi) \frac{\partial f}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{R^3 \sin \theta} \text{Im} \left[f_k^*(\theta, \phi) \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right) \right] \right\} \quad (1.16)$$

تمثل e_R, e_θ, e_ϕ أشعة الوحدة في الإحداثيات الكروية.

يمثل $\text{Im}[\dots]$: يمثل الجزء التخيلي للقيمة العظمى.

ملاحظة: نلاحظ أن التدفق الخارجي J_{out} يسلك سلوك إشعاعي محض عندما تؤول قيمة R إلى ما لانهاية، وهو سلوك غير متمائل.

$$J_{out} \sim \frac{\hbar N^2(k) k}{\mu R^2} |f_k(\theta, \phi)|^2 e_R \quad (1.17)$$

بالإضافة لذلك، فإن عدد الجسيمات التي تصطم بفتحة جهاز الكشف في كل وحدة زمنية يتناسب مع تدفق الشعاع J_{out} خلال السطح.

$$dS = R^2 d\Omega \quad (1.18)$$

يمثل $d\Omega$: عنصر الزاوية الصلبة. $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$

يمثل dS : ناقل السطح.

يعرف المقطع الفعال التفاضلي (*Section efficace différentielle*) بالعلاقة التالية [4] :

$$d\sigma = \frac{J_{out} \times dS}{J_{inc}} \quad (1.20)$$

$$d\sigma = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \equiv I(\Omega) d\Omega \quad (1.21)$$

نحصل على :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta, \phi)|^2 = I(\Omega) \quad (1.22)$$

تعطى عبارة الكلية للمقطع الفعال المرن بالعلاقة التالية:

$$\sigma_{tot} = \int I(\Omega) d\Omega \quad (1.23)$$

$$= \int |f_k(\theta, \phi)|^2 d\Omega \quad (1.24)$$

3.1.1 الموجات الجزئية :

نستخدم عبارة المؤثرة لا بلاس في الإحداثيات الكروية [5] في معادلة الموجة (1.9) لتصبح كالشكل التالي:

$$\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial \psi_k(R)}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} + \frac{\partial}{\partial \psi^2} \right] \psi_k(R) + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(R)] \psi_k(R) = 0 \quad (1.25)$$

نعوض موثر العزم الحركي L^2 في المعادلة رقم (1.25) [5] :

$$L^2 = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta^2} \right]$$

تصبح المعادلة رقم (1.25) كالتالي:

$$\left[\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial \psi_k(R)}{\partial R} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 R^2} \psi_k(R) \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(R)] \psi_k(R) = 0 \quad (1.26)$$

في نظرية ميكانيك الكم للعزوم الحركية، يتضح أن L^2 و l_z أنهما مؤثرين يتنقلان وبالتالي فإن للمؤثرين نفس الوظائف الذاتية [5].

$$L^2 \gamma_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 \gamma_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.27)$$

$$L_z \gamma_{lm}(\theta, \phi) = m \hbar \gamma_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.28)$$

يطلق على العددين الكمومي المداري و المغناطيسي m و l حيث

$$l = 0, 1, 2, 3, \quad (1.29)$$

$$-l \leq m \leq +l \quad (1.30)$$

عندما نتحرك في كمون مركزي فإن الاحتمال يعتمد فقط على $R = |R|$ في الكمون $V(R)$ ، العزم الحركي المداري محفوظ ويمكن كتابة الهاملتوني على الشكل التالي:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(R) \quad (1.31)$$

نعوض الهاملتوني في المعادلة رقم (1.26):

$$\left[\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 R^2} + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) \right] \psi_k(R) = 0 \quad (1.32)$$

وبما أن الدراسة هي في نظام تصادم ذرة- ذرة فإن دالة الموجة تتطور إلى سلسلة من موجات التكافؤ

(*Une série d'ondes partielles*)

$$\psi_k(R) = \sum_l \sum_m C_{lm}(k) \frac{u_l(R)}{kR} \gamma_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.33)$$

$C_{lm}(k)$: يمثل ثابت.

$\psi_k(R)$: يمثل دالة موجة شعاعية.

وإذا أخذت المعادلة (1.27) بعين الاعتبار، فإن استبدال المعادلة (1.32) يؤدي إلى شكل جديد لهذه المعادلة:

$$\frac{du_l(R)}{dR^2} + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) - \frac{l(l+1)}{R^2} \right] u_l(R) = 0 \quad (1.34)$$

إن هذه المعادلة (1.34) هي معادلة الموجات الشعاعية التي لا بد وأن تصف على نحو كاف ظواهر الانتشار المرن لجسيم كتلته هي μ بواسطة كمون مركزي $V(R)$

4.1.1 فرق الطور:

مما سبق، يبدو أن دراسة اصطدام ذرتين تصطدمان وتتفاعلان مع كمون مركزي $V(R)$ تنقلص إلى حل المعادلة الشعاعية.

$$\frac{du_l(R)}{dR^2} + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) - \frac{l(l+1)}{R^2} \right] u_l(R) = 0 \quad (1.35)$$

في ميكانيك الكم [4،5]، نبين أن حل $u_l(R)$ لهذه المعادلة يتم إختياره بطريقة تجعل سلوكه غير عرضي.

$$u_l(R) \sim A(k) \sin(kR - \frac{1}{2}\pi + \eta_l(k)) \quad (1.36)$$

يمثل $\eta_l(k)$: زاوية فرق الطور لموجة من الرتبة l ، ويقترن هذا المقدار بكل المعلومات المتعلقة بالكمون $V(R)$ ، وبشكل أعم بعملية التصادم.

لمستوي موجة $(P_l(\cos \theta))$ (polynômes de Legendre) بالنظر إلى تطور دالة حدوديات ليجندر المعبر عنه في المعادلة (1.13). [5] فإننا نصل إلى

$$\exp(ikz) = \exp(ikR \cos \theta) \quad (1.37)$$

$$= \sum_{i=0}^l i^l (2l+1) j_i(kR) p_l(\cos \theta) \quad (1.38)$$

ومن السهل أن نراقب عن طريق تحديد الهوية وذلك بواسطة المعادلة (1.36) والتي تبرهن أن سعة الانتشار $\psi_k(\theta, \phi)$

يمكن كتابته وفقاً لتحويلات المرحلة على النحو التالي:

$$f_k(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{i=0}^l (2l+1) (1 - e^{2i\eta_i}) P_l(\cos \theta) \quad (1.39)$$

ويلاحظ هنا أن سعة الانتشار $f_k(\theta, \phi)$ مستقل عن الزاوية الأزموثية.

عند تعويض المعادلة (1.39) في المعادلة (1.23) والتي تدل على المقطع الفعال الكلي، نستنتج من هذا التعويض العبارة التالية:

$$\sigma_{tot} = \int I(\Omega) d\Omega \quad (1.40)$$

$$= 2\pi \int_0^\pi |f_k(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \quad (1.41)$$

ويصبح من السهل الحصول عليها:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^4} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l \quad (1.42)$$

حيث استخدمنا خصائص التعامد لدالة ليجندر [6]

$$\int_0^\pi P_{l'}(\cos\theta)P_l(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \quad (1.43)$$

$\delta_{ll'}$: دلتا كرونিকা

5.1.1 التقريب الشبه كلاسيكي:

إن الحل العددي للمعادلة (1.35) يؤدي إلى الحساب الكمي للانتشار (التصادم) المرن، ويتم ذلك عن طريق فرض دالة موجة ذات سلوك مقارب والذي توضحه المعادلة (1.36)، ومع ذلك يمكن تبسيط الحساب وذلك أن القيم الكبيرة للعزم الحركي يمكن معالجتها بطريقة شبه كلاسيكية [5].

لكن في حالة التي تنخفض فيها قيمة الكمون $V(R)$ بسرعة أكبر من فرق الطور الكولومبي، نبرهن أن فرق الطور الشبه كلاسيكي يعبر عنه بهذا القانون [3،4]:

$$\eta_l \approx -\frac{u}{\hbar^2} \int_{R_0}^\infty \frac{V(R)}{\sqrt{K^2 - \frac{(l+\frac{1}{2})^2}{R^2}}} \quad (1.44)$$

مع العلم أن $R > R_0 \approx l/k$ يمثل منطقة الحركة التي يمكن الوصول لها كلاسيكيا.

يتفاوت كمون التفاعل بين ذرتين معزولتين لمسافات بعيدة داخل النواة، حيث الكمون $V(R) \sim -C_n/R^n$ و $n > 2$ ، كما أن C_n قيمة ثابتة [5].

$$\eta_l(k) \approx \frac{\mu C_n k^{n-2} \Gamma(\frac{1}{2}) \Gamma(\frac{n-1}{2})}{2\hbar^2 l^{n-1} \Gamma(\frac{n}{2})} \quad (1.45)$$

Γ : تمثل دالة أولير (La fonction d'Euler) [6]

2.1 الجسيمات المتطابقة:

لا يمكن اعتبار جسيمتين متطابقتين إلا إذا كانت جميع خصائصهما (الكتلة، السبين، الشحنة، ...) متطابقة تماما، لأنه في الميكانيك الكلاسيكية لا يشكل وجود جسيمات متطابقة في نظام فيزيائي ما أي مشكلة محددة، حيث أن لدينا إمكانية تجسيد حركة الجسيمتين على مسار كل منهما بعد ذلك يمكننا تحديد الجسيمات في أي لحظة أو موقع).

من ناحية أخرى، في ميكانيك الكم لم يعد للجسيمات مسار محدد، فإنها تصبح غير قابلة للتمييز تماما، ولتوضيح هذا الأمر نتصور حدوث تصادم بين جزيئين متطابقين مرتبطين بكتلتهم المركزية، وفي مواجهة تطابقها وبعد حدوث التباطؤ، فإن النظام الفيزيائي ينص على أن الجزيئين يجب أن لا يتغيرا. أي أن وظيفة الدالة الموجية الكلية لهذا النظام لا يمكن أن تتغير إلا إذا تغير عامل الطور (Un facteur de phase).

$$\psi(\xi_1, \sigma_1; \xi_2, \sigma_2) = \psi(\xi_2, \sigma_2; \xi_1, \sigma_1) \times \exp(i\alpha) \quad (1.46)$$

$\psi(\xi_1, \sigma_1; \xi_2, \sigma_2)$: دالة الموجة لهذا النظام.

ξ_1 و ξ_2 : تمثل مجموعة الأحداث الثلاثة.

σ_1 و σ_2 : تمثل إسقاط السبين للجسيم الأول و الجسيم الثاني.

α : مثل عدد حقيقي ثابت

عندما نطبق دوران جديد فإن النظام يعود الى حالته الابتدائية وبالتالي ، يتم ضرب الدالة الموجية

ψ في $\exp(i) = 1$ أين

$$\exp(i\alpha) = \pm 1$$

وبالتالي

$$\psi(\xi_1, \sigma_1, \xi_2, \sigma_2) = \pm \psi(\xi_2, \sigma_2, \xi_1, \sigma_1) \quad (1.47)$$

في حالة الإشارة الموجبة (+) تدل على نظام متناظر والتي تدعى بإحصائيات بوز-إينشتاين (*Bose-Einstein*) ، أما في حالة الإشارة السالبة (-) فإنها تدل على نظام غير متناظر والتي تدعى بإحصائيات فرميون-ديراك (*Fermi-Dirac*) .

1.2.1 تأثير التناظر:

$$\psi(\xi_2; \xi_1) = (-1)^S \psi(\xi_1; \xi_2) \quad (1.48)$$

في ميكانيك الكم [5]، تدل قمية S على السبين الكلي بين جسيمين، يمكننا إثبات أن التناظر بين دالة موجة الترابطية (*Fonction d'onde spatiale*) بتحديد التكافؤ بين السبين الكلي S.

عندما تصطدم جسيمان متبادلتي، فإن شعاع الموضع R يتغير إلى -R وقيمة الزاوية θ تصبح $\pi - \theta$ لكن وحدة شعاع الموضع تبقى بدون تغيير، في هذه الحالة يصبح شكل المعادلة (1.13) على النحو التالي:

$$\psi_k(R) \sim_{R \rightarrow \infty} \exp(ikz) \pm \exp(-ikz) + [f_k(\theta) \pm f_k(\pi - \theta)] \frac{\exp(ikR)}{R} \quad (1.49)$$

وتبين الحسابات أنه بالنسبة للاصطدام المرن لجسيمتين متطابقتين فإن الانتشار لم يعد بدلالة $k(\theta)$ لكن بدلالة

$$f_k(\theta) \pm f_k(\pi - \theta)$$

على النحو التالي فإن المقطع الفعال التفاضلي (*la section efficace différentielle*) الممثل في المعادلة (1.13) سواء كان تناظري أو غير تناظري فإن شكل المعادلة الجديدة يكون كالتالي:

$$\frac{d\sigma^{(S,A)}}{d\Omega} = I^{(S,A)}(\theta) = |f_k(\theta) \pm f_k(\pi - \theta)|^2 \quad (1.50)$$

اعتمادا على إذا ما كان السبين الكلي (S) زوجيا أو فرديا على التوالي تصبح المعادلة (1.41) :

$$\sigma_{tot}^{(S,A)} = 2\pi \int_0^\pi |f_k(\theta) \pm f_k(\pi - \theta)|^2 \sin \theta d\theta \quad (1.51)$$

يمكن كتابة التكامل في المعادلة (1.51) على النحو التالي:

$$|f_k(\theta) \pm f_k(\pi - \theta)|^2 = |f_k(\theta)|^2 + |f_k(\pi - \theta)|^2 \pm 2\text{Re}[f_k(\theta)f_k^*(\pi - \theta)] \quad (1.52)$$

المصطلح الأخير يسمى بالتداخل وهو المسؤول عن التبادل الذي يحدث عند وجود جسيمات متطابقة، تبين المعادلة (1.39) سعة الانتشار وخصائص الدالة $P_l(\cos \theta)$ [6].

$$P_l[(\cos \pi - \theta)] = (-1)^l P_l(\cos \theta) \quad (1.53)$$

باستعمال المعادلة (1.53) يمكن كتابة كل من $f_k(\pi - \theta)$ و $f_k^*(\pi - \theta)$ على النحو التالي:

$$f_k(\pi - \theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} [1 - \exp(2i\eta_l)] (-1)^l P_l(\cos \theta) \quad (1.54)$$

$$f_k^*(\pi - \theta) = \frac{-i}{2k} \sum_{l'=0}^{\infty} [1 - \exp(-2i\eta_{l'})] (-1)^{l'} P_{l'}^*(\cos \theta) \quad (1.55)$$

نقوم بتعويض المعادلتين (1.54) و (1.55) في المعادلة (1.51) لنحصل على شكل جديد لها:

$$\sigma_{tot}^{(S,A)} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) [1 \pm (-1)^l]^2 \sin^2 \eta_l \quad (1.56)$$

في الأخير تصبح المعادلة (1.56) بهذا الشكل النهائي والذي يظهر في المعادلتين التاليتين:

$$\sigma_{tot}^{(S)} = \frac{16\pi}{k^2} \sum_{l \text{ pair}} (2l+1) \sin^2 \eta_l \quad (1.57)$$

$$\sigma_{tot}^{(A)} = \frac{16\pi}{k^2} \sum_{l \text{ impair}} (2l+1) \sin^2 \eta_l \quad (1.58)$$

من جانب آخر نعلم أن عبارة السبين الكلي هي $S = s_1 + s_2$ لنظام فيه جسيمتان لا يمكن تمييزهما في الاصطدام بشكل عام ، إذا الهدف من برهان قانون أو معادلة المقطع الفعال هو حساب متوسط الحالات الممكنة للسبين الكلي.

في ميكانيك الكم ، لتقريب هوية جسيمات من نفس النوع يتطلب وجود جسيمتان في نفس الحالة [5،7] . عندما يكون سبين s مساوي لعدد صحيح من ثابت بلانك فإن عبارته تكتب بالشكل التالي:

$$s = m\hbar, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

تعرف هذه الجسيمات باسم جسيمات بوز (Particules de Bose).

هناك حالات تتطابق مع $s(2s+1)$ تسمى بالسبين الكلي الفردي وهناك حالات تتطابق مع $(s+1)(2s+1)$ تسمى بالسبين الكلي الزوجي.

من ناحية أخرى، الجسيمات التي تمتلك سبين يساوي نصف صحيح تكتب على الشكل التالي:

$$(1.59) \quad s = m\hbar, \quad s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$$

هذا الجسيمات تدعى بجسيمات فرميون (Particules des Fermi) .

هناك حالات تتطابق مع $s(2s+1)$ تسمى بالسبين الكلي الزوجي، وحالات تتطابق مع $(s+1)(2s+1)$ بالسبين الكلي الفردي.

بالإضافة إلى ذلك، فإن السبين الكلي تتطابق حالاته مع $(2s+1)^2$

انطلاقاً من المعادلة (1.49) التي تدل على المقطع الفعال التفاضلي فإن متوسط المرجح:

$$I(\theta) = \omega_p I^{(S)}(\theta) + \omega_i I^{(A)}(\theta) \quad (1.60)$$

$$\omega_p = \begin{cases} \frac{s+1}{2s+1} & \text{si } s \text{ est entier} \\ \frac{s}{2s+1} & \text{si } s \text{ est } \frac{1}{2} \text{ entier} \end{cases} \quad (1.61)$$

$$\omega_i = \begin{cases} \frac{s}{2s+1} & \text{si } s \text{ est entier} \\ \frac{s+1}{2s+1} & \text{si } s \text{ est } \frac{1}{2} \text{ entier} \end{cases} \quad (1.62)$$

ملاحظة: يجب في كل حالة من الحالات التحقق من أن $\omega_p + \omega_i = 1$

2.2.1 الحد الكلاسيكي:

في مجال الطاقة العالية يتم تعيين طول موجة "دي بروغلي" (La longueur d'onde de Broglie) لنظام جسيمات متطابقة في تصادم أصغر بكثير من أبعاد منطقة التفاعل. في هذه الحالة يصبح للجسيمات سلوك كلاسيكي ويسمى بالحد الكلاسيكي. وبالرغم من أن هذا النظام مكون من جسيمات متطابقة إلا أنه لا يمكن تمييزها، وكذلك إحصائيات بولزمان تطبق.

وفي مثل هذه الحالة، يحذف مصطلح التداخل الذي يخطئه تأثير التبادل. ويترتب على ذلك أن أصبح ببساطة مجموعة من المقاطع الفعالة التفاضلية لجسيم ما منحرف (d'une particule diffusé) في الزاوية θ وجسيم آخر في الزاوية $\pi - \theta$.

$$I^{(cl)}(\theta) = |f_k(\theta)|^2 + |f_k(\pi - \theta)|^2 \quad (1.63)$$

يكتب قانون المقاطع الفعالة الكلية بالشكل التالي:

$$\sigma_{tot}^{(cl)} = 2 \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l \text{ tout } l} (2l + 1) \sin^2 \eta_l \quad (1.64)$$

$$= 2\sigma_{tot}^{(BZ)} \quad (1.65)$$

على النحو الذي اقترحه جيمسون [8,9] و كرسنس و شولترز [9]، المعامل 1/2 ينبغي الأخذ به بحيث تتوافق المقاطع الفعالة المتكاملة مع تلك الموجودة في الحد الكلاسيكي.

عندما نعتمد على هذه المعطيات وفي ظل هذه الحالة تتحول المقاطع الفعالة التفاضلية على النحو التالي:

$$I^{(S,A)}(\theta) = \frac{1}{2} |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \quad (1.66)$$

إنطلاقاً من المعادلة (1.66) فإن المعادلتين (1.57) و (1.58) تكتبان بالشكل التالي:

$$\sigma_{tot}^{(S)} = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ pair}} (2l + 1) \sin^2 \eta_l \quad (1.67)$$

$$\sigma_{tot}^{(A)} = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ impair}} (2l + 1) \sin^2 \eta_l \quad (1.68)$$

الفصل الثاني

تصادم ذرتي ارغون-ارغون (Ar-Ar)

2. مقدمة عامة:

في هذا الفصل، نطبق الدراسة السابقة في الفصل الأول على تصادم ذرتي أرغون-أرغون في الحالة فيريال من الدرجة الثانية وتغيراته مع درجة الحرارة.

في هذه الدراسة نستخدم الوحدة الذرية (Unités atomique, u.a).

1.2 الأساسية (état fondementaux)، ونركز بصفة خاصة على كمون التفاعل اللازمة لتكامل معادلة دالة الموجة الشعاعية (1.34). ويستند هذا البحث أساسا إلى نقاط الطاقة الكامنة التي تم تحديدها نظريا، ثم نقوم بحساب تحولات فرق الطور المرين بدلالة طاقة التصادم. كما سيتم تقييم دقة الكمون وذلك بواسطة فحص معامل أساسيات الكمون:

لدى كمون التفاعل $V(R)$ بين ذرتين ثلاث أساسيات وهي:

- مسافات المتوسطة.
- مسافات كبيرة.
- مسافات قصيرة.

بطريقة عامة، يتم بناء منحنى التفاعل أساسا في جزئه المتوسط من البيانات العددية المتاحة.

1.1.2 المسافات المتوسطة:

هي التفاعلات من أصل كهروستاتيكي، وهذا التفاعلات يصطلح عليها بقانون كولمب.

2.1.2 المسافات الكبيرة:

بالنسبة للقيم الكبيرة ل R ، فإن قيمة الاسترداد الإلكتروني مهملة، في مثل هذه الحالة يكون لدى كمون التفاعل قوة جذب بشكل عام من حيث القوة العكسية ل R . المعاملات الثابتة والتي يرمز لها ب C_n والتي تأخذ قيم $n = 6, 8, 10$ تدعى بمعاملات التبعثر وهي تعبر عن التفاعل بين مختلف العزوم متعددة الأقطاب [11].

$$1a_0 = 0.529177 \times 10^{-8} cm$$

$$V(R) \sim -\frac{C_6}{R^6} - \frac{C_8}{R^8} - \frac{C_{10}}{R^{10}} \quad (2.1)$$

3.1.2 المسافات القصيرة:

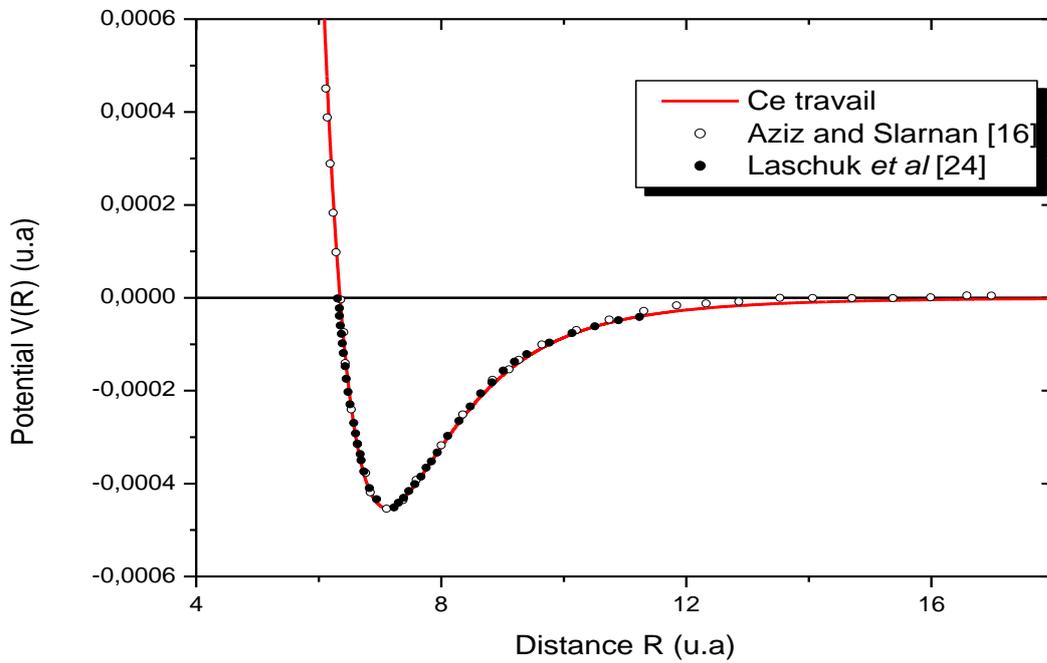
بالنسبة للتفاعلات القصيرة ل R ، فإن السحابة الإلكترونية والأسر الإلكتروني بين أنوية الذرة يولدان كمون التفاعل المضاد، هذا الكمون له شكل أسي يكتب بالشكل التالي:

$$V(R) \sim A \exp(-\alpha R) \quad (2.2)$$

يعتبر A و α خاصيتان ثابتتان.

هذا النوع من الكمونات يطلق عليه اسم كمون بورن-ماير (Le potentiel de Born-Mayer).

2.2 كمون الثنائيات الأرغون:



الشكل 2.1: يمثل منحنى الطاقة الكامنة ل Ar بدلالة المسافات

يحدث تفاعل بين ذرتي الأرغون في الحالة الأساسية $Ar(1s) + Ar(1s)$ في الحالة الأساسية على طول التناظر الجزيئي الأحادي.

1.2.2 البناء :

من أجل بناء حالة الأروغون الجزيئية، أخذنا 23 قيمة طاقوية من Zeller [13] $3.75 \leq R \leq 11.34$ ، و 15 قيمة من Maclean [14] المحصورة بين $12.28 \leq R \leq 15.37$ ، الموضحة في الجدول 1.2 من أجل المسافات القصيرة $R \leq 3.75$ نستعمل العبارة التحليلية المعطاة في المعادلة (2.1). تظهر القيم الثابتة $A=581.579$ و $\alpha = 1.553$ [13] بعد اتصال سلس مع بيانات المسافات المتوسطة. أما المسافات الطويلة نستعمل المعادلة رقم (2.1) مع استعمال المعاملات [13] التي ترد في الجدول 2.2.

$$1E_h = \begin{cases} 219476.636313 \text{ cm}^{-1} \\ 3.1577465 \times 10^5 K \\ 27.211383 \text{ ev} \end{cases}$$

المسافات (u.a)	مرجع [13] (u.a)	مرجع [14] (u.a)	هذا العمل (u.a)
3.78	-	-	0.16274
4.15	-	-	0.08148
4.53	-	-	0.03927
4.91	-	-	0.01805
5.29	-	-	0.00772
5.67	-	-	0.00289
6.04	-7.4567×10^{-4}	-	7.46975×10^{-4}
6.11	-	-4.50544×10^{-4}	-
6.42	-1.4584×10^{-4}	-4.40605×10^{-4}	-1.18802×10^{-4}
6.61	-3.90×10^{-4}	-	-3.08286×10^{-4}
6.84	-4.05×10^{-4}	-4.18643×10^{-4}	-
6.89	-4.30×10^{-4}	-	-4.32856×10^{-4}
7.10	-4.47×10^{-4}	-4.53995×10^{-4}	-

7.18	-4.51×10^{-4}	-	-4.50863×10^{-4}
7.27	-4.45×10^{-4}	-	-4.44033×10^{-4}
7.37	-4.34×10^{-4}	-4.35429×10^{-4}	-4.33547×10^{-4}
7.59	-4.05×10^{-4}	-3.91960×10^{-4}	-4.04513×10^{-4}
7.93	-3.35×10^{-4}	-	-3.34566×10^{-4}
8.34	-2.65×10^{-4}	-2.51281×10^{-4}	-2.64811×10^{-4}
8.70	-2.06×10^{-4}	-	-2.04575×10^{-4}
8.83	-	-1.76739×10^{-4}	-1.87361×10^{-4}
9.07	-1.59×10^{-4}	-	-1.59177×10^{-4}
9.10	-	-1.54025×10^{-4}	-1.55965×10^{-4}
9.64	-1.23×10^{-4}	-1.00303×10^{-4}	-1.23079×10^{-4}
10.01	-8.49×10^{-5}	-	-8.49536×10^{-5}
10.20	-	-6.94025×10^{-4}	-7.47666×10^{-5}
11.34	-3.77×10^{-5}	-2.83283×10^{-5}	-3.77777×10^{-5}
12.32	-	-1.21099×10^{-5}	-2.25835×10^{-5}
13.52	-	-1.07601×10^{-4}	-1.40318×10^{-5}
15.37	-	-7.82550×10^{-7}	-6.04886×10^{-6}
18.90	-	-	-1.51476×10^{-6}
22.68	-	-	-4.96394×10^{-7}

الجدول 2. 1: طاقة الكمون $V(R)$ بدلالة المسافات (R) من أجل نظام تصادم
Ar (1s) + Ar (1s)

$$1cm^{-1} = \begin{cases} 1.98644544 \times 10^{-23}J \\ 1.4837752 K \\ 4.556335 \times 10^{-6}E_h \end{cases}$$

$$1\text{Å} = 10^{-10}m$$

مراجع	C_6	C_8	C_{10}
[13]	64.2890	1514.86	50240
[15]	63.5300	1512.52	50152
[17]	63.5000	1510.00	48000

الجدول 2.2: يمثل قيم المعاملات C_6, C_8, C_{10} والتي تقاس بوحدة الكتلة (u.a) من أجل نظام تصادم $Ar(1s) + Ar(1s)$ ، القيم التي استعملناها في الحساب هي [13]

مراجع	R_0 (u.a)	R_e (u.a)	$-D_e$ (cm^{-1})
[18]	-	7.120	99.55460
[19]	-	7.114	96.98672
[20]	-	7.109	95.691
		81	
[21]	-	7.112	97.60126
هذا العمل	6.36	7.133	99.29430

الجدول 2.3: خصائص كمون التفاعل للثنائيات $Ar(1s) + Ar(1s)$

2.2.2 النتائج:

منحنى الطاقة الكامنة يظهر في الشكل 2.1 مقارنة مع بيانات Aziz and Slaman [16] و Laschuk [24] et al.

نلاحظ أن قيم هذا العمل متوافق بشكل جيد مع قيم Mcclean [14]، وبشكل أدق عندما نأخذ قيمة $R = 7.37 u.a$ فإن القيمة التي توافقها هي $V(R) = -4.33547 \times 10^{-4} u.a$ وهي قريبة جدا

من قيمة التي وجدها Mcclean [14] وهي $V(R) = -4.35429 \times 10^{-4} u.a$

كما نلاحظ أن عمق الكمون لدينا $e = -99.29430 cm^{-1}$ في موضع توازن $R_e = 7.133 u.a$

هذه البيانات الطيفية قابلة للمقارنة مع عمق الكمون $e = -99.55460 u.a$ ل Aziz [16]، يمكن

إجراء المزيد من المقارنات مع قيم أخرى و الموضحة في الجدول 2.3.

3.2 حساب الطور:

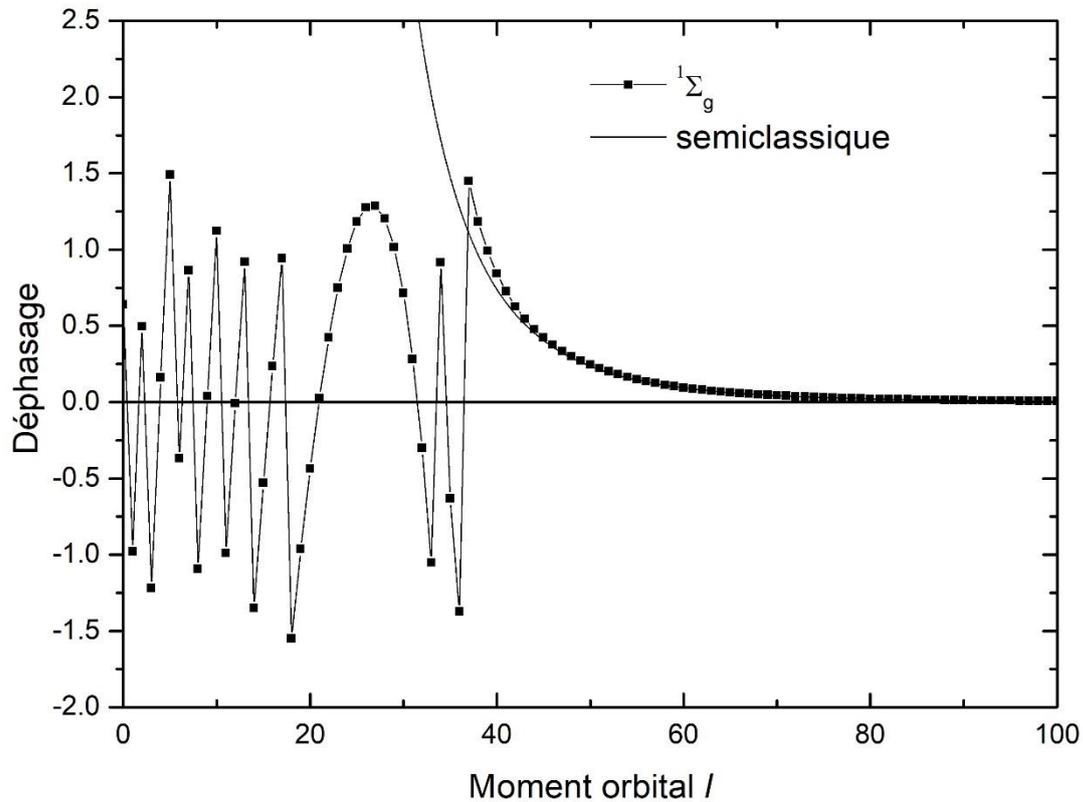
بعد ما حددنا كمون التفاعل بشكل صحيح أصبح من الممكن حل معادلة شرود ينغر (1.34) عدديا، نستعمل لوغاريتم نومروف (L'algorithm du Numerov) [21]، لحساب هذه القيم عدديا طورنا برنامج باستعمال لغة البرمجة فورتورن، يسمح لنا هذا البرنامج بتحديد تحولات الطور لكل لحظة طاوية وكل عزم الحركي المداري.

يتم حساب الطاقات $\eta_l(E)$ المحصورة بين $E_{min} = 10^{-4}u.a$ و $E_{max} = 10^{-2}u.a$ مع أخذ القيمة العظمى للعزم الحركي المداري $l_{max} = 1000$ ، تجرى الحسابات الكمية حتى تصل إلى قيمة $l = l_{sc}$. وبعد ذلك يضطر البرنامج إلى استخدام التحويل التقريبي شبه الكلاسيكي الذي توضحه المعادلة (1.44)، فتصبح من الشكل:

$$\eta_l \approx \frac{3\pi}{16} \mu C_6 \frac{k^4}{l^5} \quad (2.3)$$

الطاقة (u.a)	L_{sc} ^{40}Ar
10^{-4}	36
10^{-3}	92
10^{-2}	235

الجدول 2.4: يمثل قيم الجزء نصف كلاسيكي L_{sc} الموافق لقيم الطاقة المحصورة ما بين



الشكل 2.3: يمثل حساب الطور عند الطاقة $E = 0.01 u.a$ لغاز الأروغون ^{40}Ar

4.2 المعاملات من الدرجة الثانية لفريل (Seconds coefficients du Viriel):

يوجد وسائل فيزيائية متاحة للتحقق من جودة أو نوعية الكمون بشكل دقيق، تقوم بتقييم المعاملات من الدرجة الثانية لفريل وتحليل سلوكها الحراري، تعتمد هذه المعاملات مباشرة على كمون التفاعل $V(R)$.

1.4.2 تعريف عام:

من المعروف في الفيزياء والكيمياء [2،20] أن الخواص الحرارية لغاز أحادي الذرة الحقيقي وهي الكثافة والضغط ودرجة الحرارة يمكن وصفها في معادلة واحدة:

$$\frac{P}{K_B T} = n + B_2(T)n^2 + B_3(T)n^3 + \dots (2.4)$$

يطلق على مختلف المعاملات B بمعاملات الدرجة الثانية لفريل B ، وهي المعاملات $i^{ème}$ ، وإذا أهملنا الشروط المذكورة أعلاه $i \geq 2$ المطابقة لها، فإن المعادلة (2.4) تصبح معادلة غاز مثالي حيث يكون هناك غياب تام لأي تفاعل متبادل بين الذرات التي تشكل الغاز المعني.

بالنسبة للغازات المخففة بما فيه الكفاية، عند الكثافة المنخفضة قد تغفل معاملات الدرجة الثانية لفريل الأعلى إلى أن تكون كما هو موضح في المعادلة التالية:

$$\frac{P}{K_B T} \sim n + B_2(T)n^2 (2.05)$$

ويتبين من المعادلة (2.5) أن المعاملات من الدرجة الثانية لفريل تعبر عنها ميكانيك الإحصائية كدالة كمون بين الذرات [21].

$$B_2(T) = -\frac{1}{2} \int [\exp\left(-\frac{V(R)}{K_B T}\right) - 1] d^3R (2.6)$$

تمثل المعادلة (2.6) انحراف الغاز الحقيقي عن سلوكه المثالي عندما تكون التصادمات الثنائية مشاركة بكثرة.

في هذه الحالة يسمى بكمون التناظر الكروي (Le potentiel $V(R)$ a une symétrie sphérique) وتصبح المعادلة (2.6) بهذا الشكل:

$$B_2(T) = -2\pi \int_0^\infty \left(e^{-\frac{V(R)}{K_B T}} - 1 \right) R^2 dR (2.7)$$

أ. درجة حرارة بويل:

في بعض الأحيان، بالنسبة لدرجة حرارة معينة لما $T = T_B$ تأخذ المعاملات قيمة الصفر $B_2(T_B) = 0$. نتيجة لذلك تصبح المعادلة (2.5) معادلة غاز مثالي، وهكذا في درجة الحرارة B يتصرف الغاز الحقيقي كغاز مثالي.

ب. التصحيحات الكمية:

إن المعاملات من الدرجة الثانية لفرييل المذكورة أعلاه صالحة بالفعل للغازات في درجات حرارة مرتفعة وكثافة منخفضة، في حالة درجة الحرارة المنخفضة يجب أن تشمل المعاملات التي تظهر في المعادلة (2.5) المتعلقة بالتصحيحات الكمية، تحول المعادلة (2.7) إلى مجموع [2].

$$B_2(T) = \left[B_{cl}(T) + \left(\frac{\hbar^2}{m}\right) B_I(T) + \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^2 B_{II}(T) + \dots \right] \mp \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{\frac{3}{2}} B_0(T) \quad (2.8)$$

مع العلم أن $\hbar = 1 \text{ u. a}$.

إن الحد الأول B_{cl} مماثل لنفس الحد المعطى في المعادلة (2.7)، فهو يمثل المعاملات من الدرجة الثانية لفرييل الكلاسيكي مع حدود موضحة في المعادلة التالية:

$$B_I(T) = +2\pi N_A \left(\frac{1}{48\pi^2 k_B^3 T^3} \right) \int_0^\infty \exp\left(-\frac{V(R)}{k_B T}\right) \left(\frac{dV}{dR}\right)^2 R^2 dR \quad (2.9)$$

$$B_{II}(T) = -2\pi N_A \left(\frac{1}{1920\pi^4 k_B^4 T^4} \right) \int_0^\infty \exp\left(-\frac{V(R)}{k_B T}\right) \times \left[\frac{d^2 V}{dR^2} + \frac{2}{R^2} \left(\frac{dV}{dR}\right)^2 + \frac{10}{9k_B T} \frac{1}{R} \left(\frac{dV}{dR}\right)^3 - \frac{5}{36k_B^2 T^2} \left(\frac{dV}{dR}\right)^4 \right] R^2 dR \quad (2.10)$$

مع العلم أن B_0 من الشكل:

$$B_0(T) = 2^{-\frac{5}{2}} N_A \left[\frac{1}{2\pi k_B T} \right]^{-\frac{3}{2}} \quad (2.11)$$

N_A : ثابت عدد أفوجادرو الذي يساوي $6.02214129 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

ملاحظة: ترمز الإشارة الموجبة + في حالة الغاز إلى إحصائيات فرمي ديراك كما ترمز الإشارة السالبة - في حالة الغاز إلى إحصائيات بوزون - أينشتاين.

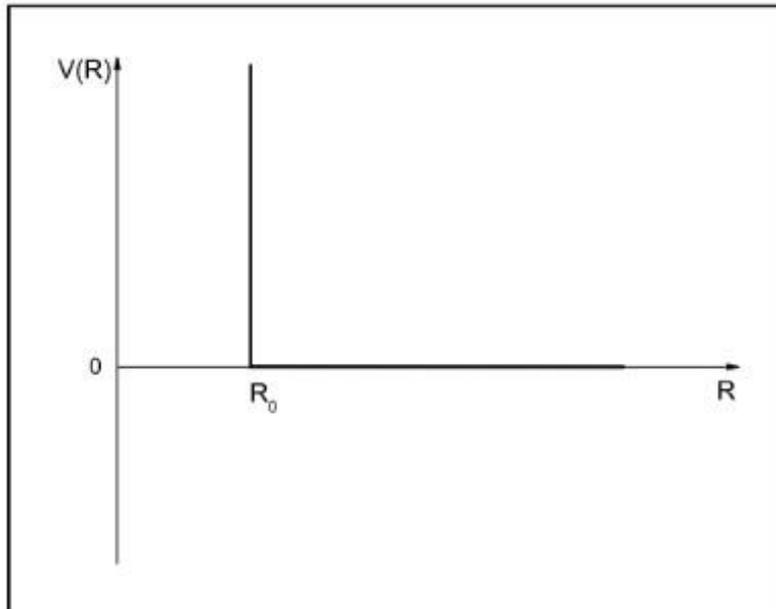
ت. الكمون التحليلي:

عندما يكون هناك نقص أو غياب للكمون المتبادل بين ذرتين ، علماء الفيزياء غالبًا ما يلجؤون إلى أنواع أخرى من الكمونات تكون في الغالب تحليلية تستعمل أحيانا على تفسير النتائج التجريبية. مزيد من التفاصيل في كتاب ريتشل [21].

• المجال الصلب:

يتم إعطاء عبارة كمون للمجال الصلب من خلال هذه المعادلة (2.12)

$$V(R) = \begin{cases} \infty & R < R_0 \\ 0 & R > R_0 \end{cases} \quad (2.12)$$



الشكل 2.3 كمون المجال الصلب.

في هذه الحالة يعطى التعبير الأسّي بهذا الشكل:

$$\exp\left(-\frac{V(R)}{k_B T}\right) = \begin{cases} 0 & R < R_0 \\ 1 & R > R_0 \end{cases} \quad (2.13)$$

ومنه تصبح معادلة المعاملات من الدرجة الثانية لفرييل الكلاسيكية:

$$B_2(T) = 2\pi \int_0^{R_0} R^2 dR \quad (2.14)$$

$$= \frac{2}{3}\pi R_0^3 \quad (2.15)$$

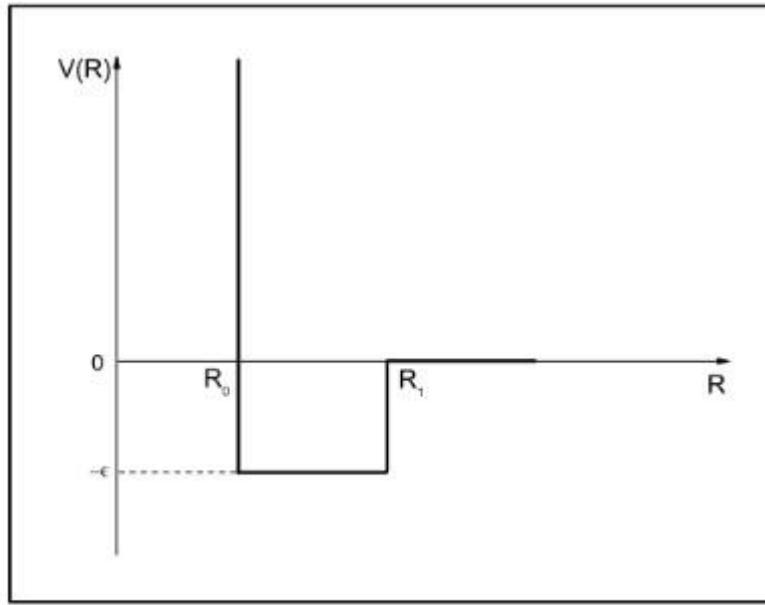
انطلاقاً من هذه المعادلة يمكن ملاحظة أن المعاملات B_2 لها كمون موجب ومستقل إلى حد ما عن درجة الحرارة T .

• البئر المربع:

يعرف كمون البئر المربع بالشكل التالي:

$$V(R) = \begin{cases} \infty & 0 < R < R_0 \\ -\epsilon & R_0 < R < R_1 \\ 0 & R > R_1 \end{cases} \quad (2.16)$$

يوضح الشكل (2.4) المخطط التمثيلي لكمون البئر المربع:



الشكل 2.4: يمثل كمون البئر

بنفس الطريقة السابقة نستنتج الشكل الآسي:

$$\exp\left(-\frac{V(R)}{k_B T}\right) = \begin{cases} \infty & 0 < R < R_0 \\ \exp\left(+\frac{\epsilon}{k_B T}\right) & R_0 < R < R_1 \\ 1 & R > R_1 \end{cases} \quad (2.17)$$

ومنه تصبح المعادلة (2.7) على النحو الآتي:

$$B_2(T) = -\frac{2\pi}{3} \left[R_0^3 + \left(1 - e^{+\frac{\epsilon}{k_B T}}\right) (R_1^3 - R_0^3) \right] \quad (2.18)$$

إذا عوضنا $\zeta = R_1/R_0$ في المعادلة (2.19) تصبح المعادلة على هذا النحو:

$$B_2(T) = \frac{2\pi}{3} R_0^3 \left[1 - (\zeta^3 - 1) \left(e^{+\frac{\epsilon}{k_B T}} - 1 \right) \right] \quad (2.19)$$

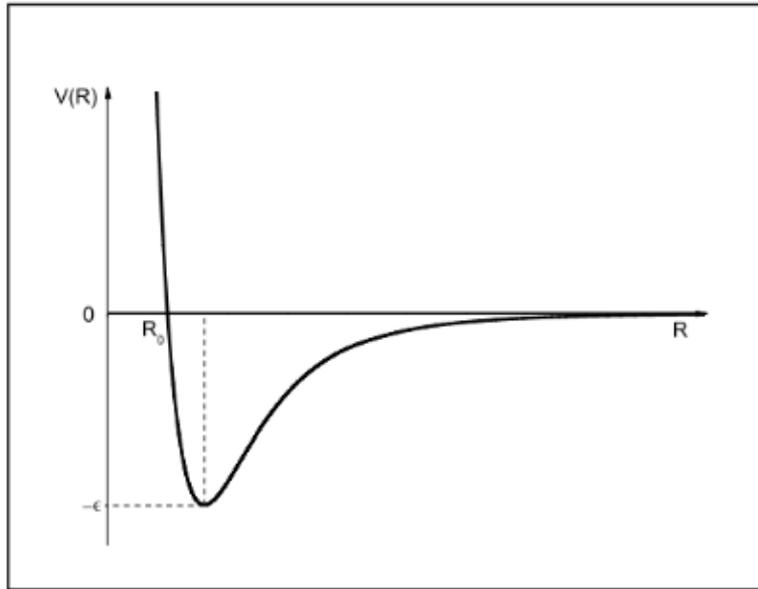
وبالتالي فإن استخدام هذا الكمون هو أكثر واقعية وذلك أن المعاملات $B_2(T)$ تعتمد بشكل مباشر على درجة الحرارة T ، ومن المهم بالنسبة لنا أنه عندما تقول درجة الحرارة إلى ما لانهاية فإن المعادلة (2.19) تقترب من القيمة $\frac{2\pi}{3} R_0^3$

• **كمون لينارد-جونس (Potentiel de Lennard-Janes):**

إن الكمون لينارد-جونس هو أكثر الكمونات استخداماً لأنه أقرب للكمون الحقيقي وذلك بسبب شكله التحليلي:

$$V(R) \sim 4\epsilon \left[\left(\frac{R_0}{R} \right)^{12} - \left(\frac{R_0}{R} \right)^6 \right] \quad (2.20)$$

المعادلة (2.20) هي معادلة الكمون المركزي، تمثل هذه المعادلة في الشكل (2.5)، بتعويض هذا الكمون يؤدي في المعادلة (2.7) تصبح معاملات على النحو الآتي [21].



الشكل 2.5: التمثيل التخطيطي لكمون لينارد-جونس.

$$B_2(T) = -2 \left(\frac{2}{3} \pi R_0^3 \right) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{4s!} \Gamma \left(\frac{2s-1}{4} \right) \left(\frac{\epsilon}{k_B T} \right)^{\frac{(2s+1)}{4}} \quad (2.21)$$

2.4.2 التطبيق:

من أجل حساب المعاملات من الدرجة الثانية لفريل الكلاسيكي وتحديد اعتمادها على درجة الحرارة قمنا بإضافة الكمون $V(R)$ في المعادلة (2.7).

يوضح الجدول 2.5 قيمنا المحسوبة المقابلة لدرجة الحرارة العالية المحصورة بين $T = 200 \text{ K}$ و $T = 3000 \text{ K}$ ، نقوم بمقارنة القيم التي وجدناه لمعاملات من الدرجة الثانية لفريل بتلك التي وجدها Eckhard Vogel [22]. تتفق قيمنا بشكل جيد مع قيم Eckhard Vogel [22]، وبشكل أكثر تحديد وجدنا

أن غاز الأروغون ^{40}Ar عند درجة الحرارة $T = 300 \text{ K}$ أن القيمة الموافقة لها هي

$B_2 = -15.22 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ هذه القيمة قريبة بشكل ممتاز لقيمة Eckhard Vogel [22] عند نفس

درجة الحرارة حيث أن القيمة الموافق لها هي $B_2 = -15.18 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$.

هذه المعاملات ممثلة في الشكل 2.5 والمحصورة بين $200 \leq T \leq 3000$ مقارنة مع بيانات Eckard

Vogel [22] و Amour and Masson [23] و Eduardo and Laschuk [24] و Dymond and

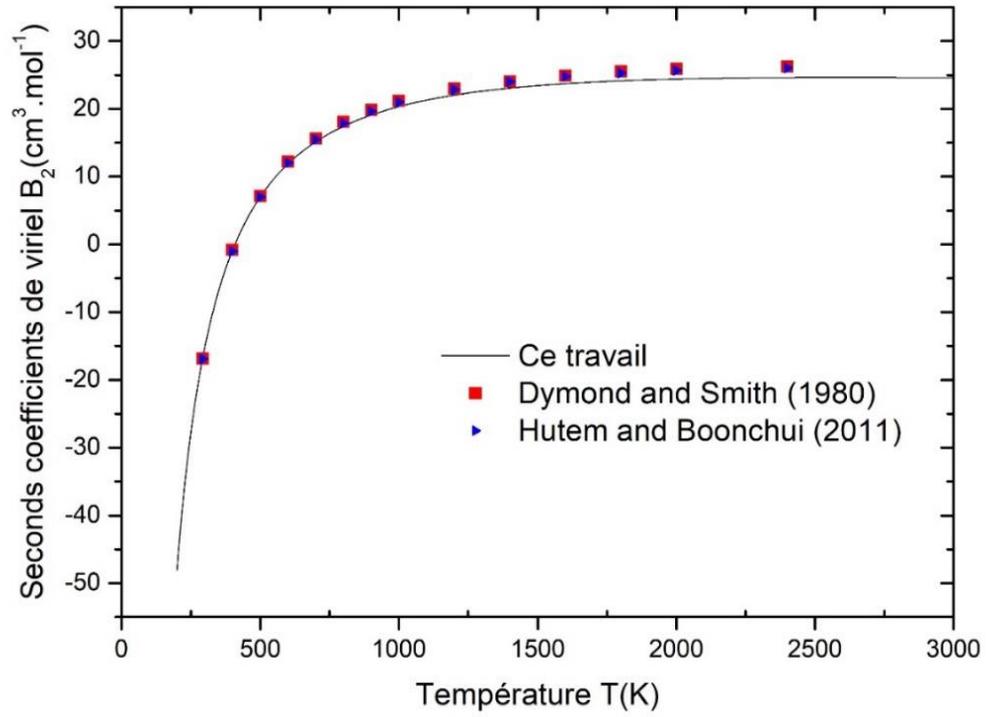
Smith [25] و Hutem and Boonchui [26] يظهر بشكل عام اتفاق جد جيد مع نتائجها في مجال

درجات الحرارة المنخفضة و المرتفعة.

درجة الحرارة $T(k)$	^{40}Ar	
	هذا العمل	مرجع [22]
200	-48.07	-42.90
300	-15.22	-15.18
400	-0.86	-0.85
500	7.02	7.01
600	11.89	11.87

700	15.15	15.12
800	17.43	17.41
900	19.10	19.07
1000	20.35	20.32
1200	22.04	22.01
1400	23.08	23.05
1600	23.73	23.70
1800	24.15	24.12
2000	24.40	24.37
2200	24.55	24.52
2400	24.63	24.60
2600	24.65	24.62
2800	24.63	24.60
3000	24.59	24.56

الجدول 2.5: يمثل هذا الجدول قيم معاملات الدرجة الثانية لفريلال ب $cm^3 mol^{-1}$ لغاز الأروغون ^{40}Ar بدلالة درجة الحرارة، النتائج مقارنة مع قيم Eckhard Vogel [21].



الشكل 2.6: يمثل معاملات من الدرجة الثانية لفريل بدلالة درجة الحرارة.

الفصل الثالث

الخصائص الحرارية لتصادم

ذرة آرغون-آرغون

الفصل الثالث

3. الخصائص الحرارية لتصادم ذرة أرغون-أرغون

في الفصل الثالث سنقوم نظريا بتحليل بعض الخصائص الحرارية لغاز الأرغون. في النظرية الكمية للغازات الكمومية [1,2]، إذا افترضنا أن الغاز مخفف فإنه يمكن ربط هذه الخصائص الفيزيائية الحرارية مع تحولات الطور،

كجزء من نموذج تشابمان-إنسكوغ، سنحاول تحديد سلوك الخصائص الفيزيائية الحرارية (للزوجة، الانتشار، الناقلية الحرارية) كدالة لدرجة الحرارة.

وستتم حسابات هذه الخصائص في مجال الطاقة المنخفضة والعالية مع وجود تأثيرات تناظرية لغاز الأرغون.

1.3 حركية الغاز:

من أجل حل معادلة بولتزمان، التي تم تفصيلها في الملحق أ، والتي تصف حركية الغاز اقترح تشابمان-إنسكوغ [1,2]، طريقة الاضطراب لتحديد وظائف التوزيع، وهذا ينطوي على افتراض إزاحة طفيفة للغاز فيما يتعلق بحالته المستقرة، باستعمال هذه الطريقة تمكنوا من تطوير وظيفة التوزيع حتى الدرجة الأولى [1,2].

$$f \approx f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + O(\epsilon) \quad (3.1)$$

تمثل $f^{(0)}$: دالة توزيع الغاز في حالة التوازن.

ϵ : خاصية تموت بسرعة.

$O(\epsilon)$: يمثل درجات أعلى بدلالة ϵ

باستعمال هذه الطريقة، تمكن تشابمان وإنسكوغ من التعبير عن جميع المعاملات النقل كدالة لسلسلة

التكاملات، تسمى بتكاملات التصادم (Intégrales des collision) [1,2,10].

$$\Omega^{(n,s)}(T) = \frac{1}{(s+1)!(k_B T)^{s+2}} \int_0^\infty \sigma^{(n)} E^{s+1} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE \quad (3.2)$$

الدوال $\sigma^{(n)} E = \sigma^{(n)}$ هي المقطع الفعال متصلا بالطاقة. عندما تكون $n \geq 1$ تعطى العبارة بالشكل

التالي:

$$\sigma^{(n)}(E) = 2\pi \left[1 - \frac{(-1)^{n+1}}{2(n+1)} \right]^{-1} \int_0^\pi (1 - \cos^n \theta) I(\theta) \sin \theta d\theta \quad (3.3)$$

حيث كما رأينا من قبل، $I(\theta) = |f_k(\theta)|^2$ هو الاختلاف الجزئي بين المقطع الفعال (1.21) وسعة الانتشار المبينة في المعادلة (1.39).

نعوض المعادلة (1.39) في المعادلة (3.3)، العلاقة الناتجة عن هذا التعويض تعبر عن أول قسمين من أقسام المقطع الفعال [10]، والذي يوضح في نقطتين الاتيتين:

• مقطع الفعال الناشر لما :

$$\begin{aligned} \sigma_D &= \sigma^{(1)}(E) \\ \sigma_D &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\eta_{l+1} - \eta_l) \end{aligned} \quad (3.4)$$

• مقطع الفعال للزوجة لما

$$\begin{aligned} \sigma_V &= \frac{2}{3} \sigma^{(2)} \\ \sigma_V &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(l+1)(l+2)}{(2l+1)} \sin^2(\eta_{l+2} - \eta_l) \end{aligned} \quad (3.5)$$

يتم الحصول على العلاقتين (3.4) و(3.5) بعد اجراء حساب طويل بالاعتماد على المعادلة (1.43) وتطبيق خصائص دوال لوجوندر.

عندما تكون الذرتان المتصادمتان متطابقتان يجب استبدال المقطع الفعال التفاضلي الغير متماثل، والذي يظهر في المعادلة (3.3) أو ما يسمى بالشكل المتماثل المعطى في المعادلة (1.66). بعد الحساب تكتب المعادلة (3.3) بالشكل التالي:

$$\sigma^{(1)}(E) = \pi \int_0^\pi (1 - \cos \theta) |f_k(\theta) \pm f_k(\pi - \theta)|^2 \sin \theta d\theta \quad (3.6)$$

من أجل $n = 1$ ، فإن

$$\sigma^{(2)}(E) = \frac{3\pi}{2} \int_0^\pi (1 - \cos \theta) |f_k(\theta) \pm f_k(\pi - \theta)|^2 \sin \theta d\theta \quad (3.7)$$

من أجل $n = 2$ ، فإن الإشارة + تستخدم في حالة التناظر (S) وأما الإشارة - فإنها تستعمل في حالة اللاتناظر (A).

2.3 النشر الذاتي:

تبين طريقة تشابمان - إنسكوغ، أن معامل الانتشار D لغاز مخفف وأحادي الذرة، لغاز آخر مخفف وأحادي الذرة، تساوي [1,2,4]:

$$D(T) = \frac{3}{8(n_1+n_2)} \left(\frac{\pi k_B T}{2\mu}\right)^{1/2} \frac{1}{\Omega^{(1,1)}(T)} \quad (3.8)$$

تصبح المعادلة (3.2) بهذا الشكل:

$$\Omega^{(1,1)}(T) = \frac{1}{2(k_B T)^3} \int_0^\infty E^2 \sigma_D(E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE \quad (3.9)$$

بشكل عام، لما $n_1 \ll n_2 = n$ ، فإن معامل الانتشار D في هذه الحالة يصبح بهذا الشكل:

$$(3.10) \quad D(T) \simeq \frac{3}{8\pi} \left(\frac{\pi k_B T}{2\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Omega^{(1,1)}(T)}$$

معامل الانتشار D المعبر عنه في المعادلتين (3.8) و (3.10) هو دالة كثافة، بالنسبة للحسابات عند

ضغط معين فإنه من المعتاد استعمال قانون الغازات المثالية $p = nk_B T$.

نقترح هنا تحليل معاملات الانتشار الذاتي D لغاز الأرجون في مجال درجات الحرارة المرتفعة والمنخفضة، في مجال درجات الحرارة المرتفعة تكون تأثيرات التماثل ضئيلة، فهذه التأثيرات الكمومية البحتة تظهر بشكل أساسي في درجات الحرارة المنخفضة.

نستخدم حسابات الطور التي قمنا بحسابها في الفصل الثاني والمبينة في الجدول 2.4.

يتم عرض نتائجنا لحساب معامل الانتشار $D(T)$ في الجدول 3.1 لغاز الأرجون ^{40}Ar عند درجات الحرارة

المحصورة بين $T = 83.81 \text{ K}$ إلى $T = 1000 \text{ K}$.

تتم مقارنة قيمنا في الجدول 3.1 مع القيم التي تم الحصول عليها بواسطة Bo Song et al [27]، كمثال

على ذلك عند درجة حرارة $T = 83.81 \text{ K}$ وجدنا أن قيمة معامل الانتشار

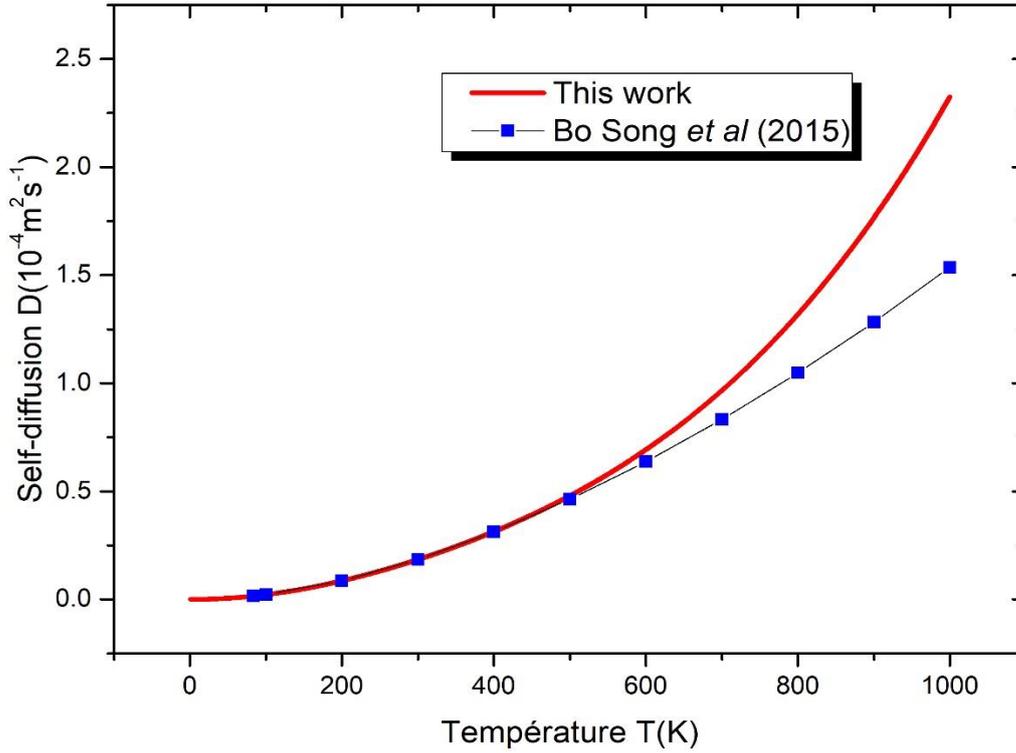
عند $D(T) = 0.1579 \times 10^{-4} m^2 s^{-1}$ والتي تشبه قيمة $D(T) = 0.1548 \times 10^{-4} m^2 s^{-1}$

3.1 Bo Song et al [27] كما هو ممثل في الشكل

درجة الحرارة T (K)	D ($10^{-4} m^2 s^{-1}$)	
	هذا العمل	مرجع [27]
83.81	0.01548	0.01579
100	0.02236	0.02238
150	0.04965	0.04969
200	0.08650	0.08661
273	0.15524	0.15569
300	0.18482	0.18509
400	0.31407	0.31183
500	0.47961	0.46339
600	0.69273	0.63761
700	0.96743	0.83301
800	1.31932	1.04850
900	1.76550	1.28320
1000	2.32475	1.53650

الجدول 3.1: يمثل قيم معامل الانتشار $D(T)$ في مجال درجات الحرارة، النتائج مقارنة مع

[27] Bo Song et al.



الشكل 3.1: يمثل منحنى معامل الانتشار الحراري $D(T)$ بدلالة درجة الحرارة $T(K)$ لغاز الأروغون ^{40}Ar

في هذا المجال من درجات الحرارة يكون لتأثيرات الكمية أهمية كبيرة، وهذا يتطلب منا إدخال تأثيرات التناظرية بسبب تماثل ذرات الاصطدام والسبين النووي، في حالة ذرة غاز الأروغون المستقرة فإن السبين النووي يساوي 0

نستخدم المعادلة (3.6) وندرج فيها معادلتنا سعة الانتشار الحراري (1.39) و (1.54) وبواسطة خصائص لوجوندر الرياضية وبعد حساب طويل نجد العلاقتين التاليتين [8،9]:

$$\sigma_D^{(s)}(E) = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ pair}} (2l + 1) \sin^2 \eta_l \quad (3.11)$$

$$\sigma_D^{(A)}(E) = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ impaire}} (2l + 1) \sin^2 \eta_l \quad (3.12)$$

تمثل المعادلتين (3.11) و(3.12) حالة التناظر.

في حالة عدم التماثل ولمزيد من التفاصيل فإن الحسابات مبينة في الملحق ب.

من السهل ملاحظة أن هاتين العلاقتين (3.11) و(3.12) متطابقتان مع القطع الفعال المرن الكلي، والتي تعطىها التعبيرات $\sigma_D^{(S)} \equiv \sigma_{tot}^{(S)}$ و $\sigma_D^{(A)} \equiv \sigma_{tot}^{(A)}$ والمعطاة في العلاقتين (1.67) و(1.68).

تتفاعل ذرة الأرجون على طول الحالة الجزيئية $1\Sigma_g^+$ وبالتالي فإن السبين الكلي يساوي الصفر، مع مراعاة السبين النووي لذرة الأرجون ^{40}Ar ($s = 0$) ومنه نحصل وفقاً للمعادلتين (1.60) و(1.61) على ما يلي:

$$\sigma_D = \frac{s+1}{2s+1} \sigma_D^{(S)} + \frac{s}{2s+1} \sigma_D^{(A)} \quad (3.13)$$

$$= \sigma_D^{(S)} \quad (3.14)$$

3.3 اللزوجة والناقلية الحرارية:

كجزء من نموذج تشابمان - إنسكوغ للغازات أحادية الذرة والغازات المخففة يتم التعبير عن اللزوجة كدالة لتكامل الاصطدام الذي يبين في المعادلة التالية:

$$\Omega^{(2,2)}(T) = \frac{1}{4(k_B T)^4} \int_0^\infty E^3 \sigma_V(E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE \quad (3.15)$$

تعطى بدلالة درجة الحرارة بهذا الشكل [2]:

$$\eta(T) = \frac{5\sqrt{2\mu\pi k_B T}}{16\Omega^{(2,2)}(T)} \quad (3.16)$$

المرجع [27]	هذا العمل	T (K) درجة الحرارة
6.86080	6.78266	83.81
8.12860	8.11803	100
12.07500	12.07360	150
15.86000	18.85750	200
20.94000	20.95390	273
22.67300	22.75560	300
28.61300	29.61220	400
33.92100	37.78730	500
38.77500	48.31830	600
43.28800	61.98750	700
47.54000	79.51900	800
51.58100	101.67300	900
55.54100	129.28300	1000

الجدول 3.2: يمثل قيم اللزوجة η ($\mu\text{pa.s}$) بدلالة درجة الحرارة T

في العلاقة (3.15) المقدار $\sigma_V(E) = \frac{3}{2} \sigma^{(2)}(E)$ يسمى بالمقطع الفعال العرضي في اللزوجة، من المعادلة (3.3) نجد المعادلة التالية:

$$\sigma_V(E) = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos^2\theta) I(\theta) \sin\theta d\theta \quad (3.17)$$

نعوض قيمة $I(\theta) = |f_k(\theta)|^2$ في المعادلة (3.17):

$$\sigma_V(E) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(l+1)(l+2)}{(2l+3)} \sin^2(\eta_{l+2} + \eta_l) \quad (3.18)$$

يمثل الجدول 3.2 قيم اللزوجة η المحصورة بين $T = 83.81 \text{ K}$ و $T = 1000 \text{ K}$ ، عند مقارنة قيمنا مع قيم Bo Song [27] نلاحظ أنه من الدرجة الحرارة $T = 83.81 \text{ K}$ حتى $T = 500 \text{ K}$ وعلى سبيل

المثال عند درجة الحرارة $T = 100 K$ فإن قيمة معامل اللزوجة $\eta = 8.118 \mu\text{pa}\cdot\text{s}$ وهي متوافقة بشكل جيد مع قيمة [27]Bo Song عند نفس درجة الحرارة $\eta = 8.128 \mu\text{pa}\cdot\text{s}$ ، يتم توضيح هذه المقارنة بشكل جيد في الشكل 3.2.

في مجال درجات الحرارة المنخفضة يكون للتأثيرات الكمومية أهمية ويرجع ذلك بسبب هوية الذرات المتصادمة، لذلك من الملائم تضمين تأثيرات التناظر والسبين.

بعد حساب طویل تعطى عبارة المقطع الفعال التناظري للزوج بهذا الشكل:

$$\sigma_V^{(S,A)}(E) = \pi \int_0^\pi (1 - \cos^2 \theta) |f_k(\theta) \pm f_k(\pi - \theta)|^2 \sin \theta d\theta \quad (3.19)$$

تقودنا هذه المعادلة والحسابات إلى علاقة تسمى متوسط القسم الفعال للزوج (تم التطرق لبرهانها في الفصل الأول والمبينة في المعادلة (1.60)).

$$\sigma_V = \omega_1 \sigma_V^{(S)} + \omega_2 \sigma_V^{(A)} \quad (3.20)$$

نعلم أن السبين النووي للأرغون يساوي الصفر ($s = 0$) نعلم أيضا أن:

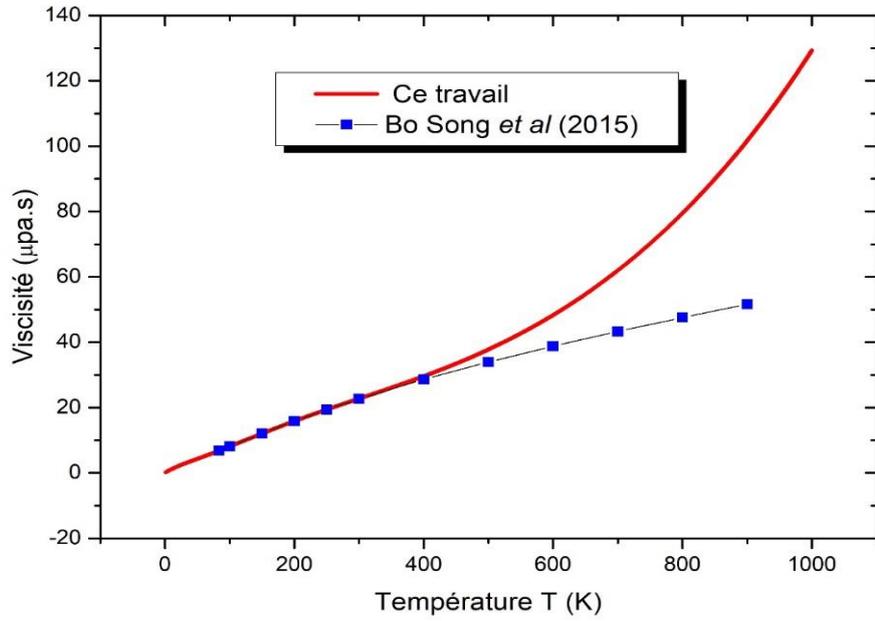
$$\begin{cases} \omega_1 = \frac{(s+1)}{(2s+1)} \\ \omega_2 = \frac{s}{2s+1} \end{cases} \quad (3.21)$$

عند تعويض قيمة السبين النووي تصبح من بهذا الشكل:

$$\begin{cases} \omega_1 = 1 \\ \omega_2 = 0 \end{cases} \quad (3.22)$$

انطلاقا من النتيجة (3.22) فإن متوسط المقطع الفعال التناظري للزوج هو:

$$\sigma_V = \sigma_V^{(S)} \quad (3.23)$$



الشكل 3.2: يمثل قيم اللزوجة η بدلالة درجة الحرارة T (K)

من ناحية أخرى، في نظرية حركية الغاز [2]، فإن من معرفة معامل اللزوجة يمكننا استنتاج قيم الناقلية الحرارية λ . المعادلة التالية تبين الارتباط أو العلاقة بين اللزوجة والناقلية الحرارية:

$$\lambda(T) = \frac{5 C_v}{4\mu} \eta(T) \quad (3.21)$$

C_v : تمثل حرارة خاصة لكل ذرة مفترضة وبشكل عام تساوي $\frac{3k_B}{2}$ من أجل غاز أحادي الذرة [2].

كما يمكن كتابة المعادلة (3.21) بهذا الشكل أيضا:

$$\lambda(T) = \frac{15}{4} \frac{R}{m} \eta(T) \quad (3.22)$$

تمثل m الكتلة المولية للمادة الكيميائية و R ثابت المول للغازات حيث أن R يساوي:

$$R = 8.315 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

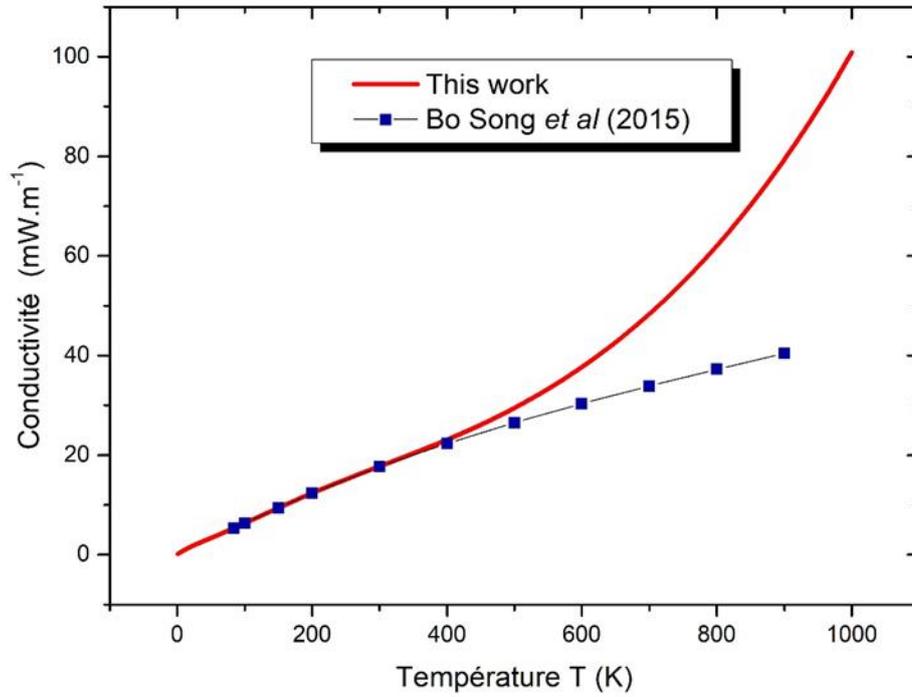
$\lambda (mW.m^{-1}.K^{-1})$		
المرجع [27]	هذا العمل	درجة الحرارة T (K)
5.3561	5.2919	83.81
6.3449	6.3338	100
9.4253	9.4200	150
12.3810	12.3723	200
16.3550	16.3486	273
17.7120	17.7543	300
22.3860	23.1039	400
26.5340	37.7873	500
30.3440	48.0793	600
33.8870	61.9875	700
37.2240	79.5190	800
40.3960	101.6730	900
43.4320	129.2830	1000

الجدول 3.3: يمثل قيم الناقلية الحرارية λ بدلالة درجة الحرارة T(K) لغاز الأروغون ^{40}Ar

نقوم بعرض نتائجنا كما هو موضح في الجدول 3.3 والذي يمثل قيم الناقلية الحرارية λ بدلالة درجة الحرارة T(K) المحصورة بين $T = 83.81 \text{ K}$ و $T = 1000 \text{ K}$ لغاز الأروغون ^{40}Ar بالمقارنة مع قيم Bo Song [27] نلاحظ أن قيمنا من درجة الحرارة $T = 83.81 \text{ K}$ حتى $T = 400 \text{ K}$ جد متوافقة مع قيم Bo Song [27] نأخذ عينة مثلا عند درجة حرارة $T = 100 \text{ K}$ فإن قيمة الناقلية الحرارية التي تحصلنا عليها هي

الحرارة حيث $\lambda = 6.34 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ بينما نلاحظ اختلافا كبيرا ابتداءا من درجة الحرارة $T = 500\text{K}$ عند نفس درجة

يتم توضيح هذه المقارنة جيدا في الشكل 3.3.



الشكل 3.3: يمثل منحنى الناقلية الحرارية بدلالة درجة الحرارة $T(\text{K})$.

الخاتمة:

تمكنا من خلال هذه المذكرة من دراسة وتحليل بعض الخصائص الحرارية لاصطدام ذرة ارغون-ارغون (Ar-Ar) مخفف بواسطة نموذج تشابمان-إنسكوغ من خلال إدخال الكمون المبين في معادلة شرودينغر وحلها رقميا ثم استخدمنا هذه الحسابات لتحليل سلوكها مع درجات الحرارة المرتفعة والمنخفضة وعليه نستخلص مما سبق النتائج التالية:

- ❖ تمكنا من حساب كمون الثنائيات لغاز الأرغون رقميا باستعمال الحاسوب وبواسطة لغة الفورترن والذي على أساسه قمنا بحساب معادلة الموجة الشعاعية عدديا.
- ❖ تمكنا من تحديد عمق الكمون والذي يساوي $e = -99.29430 \text{ cm}^{-1}$ والذي يتوافق بشكل ممتاز مع المرجع [16].
- ❖ تمكنا من معرفة نتائج حساب تحولات الطور المحصور بين $10^{-2} u.a < E < 10^{-4} u.a$ واستغلالها لحساب بعض الخصائص الحرارية.
- ❖ تمكنا من حساب وتحليل معاملات درجة الثانية لفريل بدلالة درجة الحرارة ومقارنتها مع عدة مراجع عالمية حيث كانت النتائج جد متوافقة.
- ❖ تمكنا من حساب بعض الخصائص الحرارية (الانتشار الحراري، اللزوجة، الناقلية الحرارية) باستعمال تحولات الطور لنظائر الأرغون، النتائج كانت جد متوافقة مع المرجع [27] عند درجات الحرارة المحصورة بين $83.81 \text{ K} < T < 500 \text{ K}$ فيما كانت مختلفة في درجات الحرارة الأعلى من ذلك.

في الأخير، نستطيع القول إننا تمكنا من حساب وتحليل بعض الخصائص الحرارية لتصادم ذرة ارغون-ارغون انطلاقا من كمون الثنائيات لغاز الأرغون وتحولات الطور وكل هذا تم بواسطة جهاز الحاسوب وبذلك نكون قد حققنا هدف هذه المذكرة.

الملحق أ

معادلة بولتزمان:

تعتمد عملية نقل أي غاز على معادلة بولتزمان (Equation de Boltzmann) في هذا الملحق أ سنحدد بطريقة ملخصة ما يجب معرفته حول هذه المعادلة. يتم وصف خصائص الغاز المخفف بالكامل من خلال دالة التوزيع $f(t, r, v)$ في فضاء الطور للإحداثيات والسرعات. بالنسبة لمزيج من الغاز فهو يعتبر قوة خارجية F_i ، يكون العدد الإجمالي للذرات في حجم العنصر $dr_i dv_i$ والمعرفة بهذا الشكل:

$$dn_i = f_i(t, r_i, v_i) dr_i dv_i \quad (أ.1)$$

إضافة لذلك، إذا افترضنا أن التصادمات الثنائية فقط يمكن أن تحدث في الغاز، فإن دالة التوزيع $f_i(t, r_i, v_i)$ ووفقا لمبرهنة لوفيل (Le théorème de Liouville) [2]، تمثل حالا للتكامل التفاضلي المبين على النحو التالي:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{P_i}{m_i} \nabla_{r_i} f_i + F_i \nabla_{p_i} f_i = 2\pi \sum_j \iint v_{ij} (f'_i f'_j - f_i f_j) dr_i dP_j \quad (أ.2)$$

تسمى المعادلة (أ.2) بمعادلة بولتزمان، كما أن عبارة دافع الذرة الأولى تعطى بهذا الشكل $P_i = m_i v_i$.

$$v_{ij} = v_{ji} = \left| \frac{p_i}{m_i} - \frac{m_i}{p_i} \right| \quad (أ.3)$$

ويشار إلى دالة التوزيع $f_i(t, r_i, v_i)$ بعد الاصطدام، التكاملات التي تظهر في الجزء الأيمن من المعادلة (أ.2) وتسمى هذه التكاملات بتكاملات الاصطدام.

وتشكل المعادلة (أ.2) الأسس لمناقشة خصائص نقل الغازات المخففة، وترد الاستثناءات الأكثر تفصيلا لهذه المعادلة في الكتب المتخصصة، كما هو الحال في المرجعين [2] و [19].

الملحق ب

المقطع الفعال التفاضلي مع التناظر:

إن المقطع الفعال التفاضلي مع التناظر تعطى عبارته بهذا الشكل:

$$\sigma_D^{(S,A)}(E) = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos\theta) I^{(S,A)}(\theta) \sin\theta d\theta \quad (\text{ب.1})$$

$$I^{(S,A)}(\theta) = \frac{1}{2} |f_k(\theta) \pm f_k(\pi - \theta)|^2 \quad (\text{ب.2})$$

بمعرفة خاصية وظائف دوال لوجوندر $P_l[\cos(\pi - \theta)] = (-1)^l P_l(\cos\theta)$ ، يتم كتابة عبارات ساعات الانتشار:

$$f_k(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - e^{2i\eta_l}) P_l(\cos\theta) \quad (\text{ب.3})$$

$$f_k(\pi - \theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - e^{2i\eta_l}) (-1)^l P_l(\cos\theta) \quad (\text{ب.4})$$

عندما نقوم بتعويض كل من المعادلتين (ب.3) و(ب.4) في المعادلة (ب.1) إلى مساواة جديدة مبينة في المعادلة التالية:

$$\sigma_D^{(S,A)}(E) = \pi \int_0^\pi \left| \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - e^{2i\eta_l}) [1 \pm (-1)^l] P_l(\cos\theta) \right|^2 (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta \quad (\text{ب.5})$$

تتحول المعادلة (ب.5) كالاتي:

$$\sigma_D^{(S,A)}(E) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) [1 \pm (-1)^l] [1 \pm (-1)^{l'}] e^{i(\eta_l - \eta_{l'})} \sin\eta_l \sin\eta_{l'} \quad (\text{ب.6})$$

نستخدم بعد ذلك خصائص لوجوندر [6]

$$\int_0^\pi P_{l'}(\cos\theta) P_l(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{l'l'} \quad (\text{ب.7})$$

$$(\cos\theta) \cdot P_l(\cos\theta) = \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1}(\cos\theta) + \frac{l}{2l+1} P_{l-1}(\cos\theta) \quad (\text{ب.8})$$

ينتهي بنا الأمر مع:

$$\sigma_D^{(S,A)}(E) = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 \pm (-1)^l]^2 \sin^2\eta_l \quad (\text{ب.9})$$

يتضح من هذه المعادلة أنه بالنسبة للمتناظر (S)، تشير العلامة + إلى التناظر الزوجي.

$$\sigma_D^{(S)}(E) = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ pairs}} (2l+1) \sin^2\theta \eta_l \quad (\text{ب.10})$$

ومن جهة أخرى، فإن الحالة اللاتناظرية (A)، تشير العلامة - إلى الحالة الفردية والتي تعبر على اللاتناظرية.

$$\sigma_D^{(A)}(E) = \frac{8\pi}{k^2} \sum_l \text{impairs}(2l+1) \sin^2 \eta_l \quad (\text{ب.11})$$

وهذا يدل على أن المقاطع الفعالة هي النشر ببساطة مساوية للفرعين (S) و (A) اللذين قدمهما في المعادلتين (1.67) و (1.68).

$$\sigma_D^{(S,A)} \equiv \sigma_{el}^{(S,A)} \quad (\text{ب.12})$$

-
- [1] S. Chapman and T.G. Cowling, the Mathematical Theory of Non-Uniform Gases, (Cambridge University Press, Cambridge, 1952).
- [2] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtis, and R.B. Bird, Molecular Theory of Gases and Liquids, (Wiley and Son, Inc, New York 1964).
- [3] B.H. Bransden and C.J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules, (Longman, London, 1983).
- [4] N.F. Mott and H.S.W. Massey, the Theory of Atomic Collisions, (Oxford University Press, Oxford, 1965).
- [5] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory, (Pergamon Press, Oxford, 1981).
- [6] M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, (Dover Publications, Inc, New York. 1972).
- [7] D. Blokhintsev, Principes de mécanique quantique, (traduction française, Edition Mir, Moscou, 1981).
- [8] M.J. Jamieson, G.W.F. Drake, and A. Dalgarno, Phys. Rev. A 51, 3358 (1995).
- [9] P.S. Krsic and D.R. Schultz, At. Plasma-Matter. Interaction Data Fusion 8, 1 (1998); J. Phys. B 32, 3485 (1999); Phys. Rev. A 60, 2118 (1998).
- [10] M.R. Flannery, in Atomic, Molecular, and Optical Physics Handbook, Ed. G.W.F. Drake, (AIP Press, Woodbury, New York, 1996).
- [11] H. Margenau and W.W. Walsen, Rev. Mod. Phys. 8, 22 (1936).
- [12] S. Zeller, M. Kunitski, J. Voigtsberger, M. Waitz, F. Trinter, S. Eckart, A. Kalinin, A. Czasch, L.Ph.H. Schmidt, T. Weber, M. Schoffler, T. Jahnke, and R. Dorner, Determination of Interatomic Potentials of He_2 , Ne_2 , Ar_2 , and H_2 by Wave Function Imaging, Phys. Rev. Lett. 121. 083002 (2018.)
- [13] K. Patkowski and K. Szalewicz, Argon pair potential at basis set and excitation limits, J. Chem. Phys. 133, 094304 (2010).
- [14] A. D. McLean, B. Liu, and J. A. Barker, A *ab initio* calculation of argon–argon potential, The Journal of Chemical Physics 89, 6339 (1988); doi: 10.1063/1.455400.

-
- [15] M.A. Moltsev, I.V. Movozov, and E.L. Osina, *Tepofizkio. Vysokih. Temperatura*, Vol. 57, 37-40 (2019).
- [16] R. A. Aziz and M. J. Slarnan, *J. Chern. Phys.* 92, 1030 (1990).
- [17] R.A. Aziz, *J. Chem. Phys.* 99, 4518 (1993).
- [18] Cybulski, S.M. Toczyłowski, R.R. *J. Chem. Phys.* 111, 10520-10528 (1999).
- [19] Van Mourik, T. Wilson, A.K. Dunning, T.H., Jr. *Mol. Phys.* 96, 529-547 (1999).
- [20] Fernandez, B. Koch, H. *J. Chem. Phys.* 109, 10255-10262 (1998).
- [21] L.E. Reichl, *a Modern Course in Statistical Physics*, (University of Texas Press, Austin, 1984).
- [22] Eckhard Vogel a, Benjamin Jäger a, Robert Hellmann a & Eckard Bich a
An Institut für Chemie, Universität Rostock, Albert-Einstein-Straße 3a, Rostock,
D-18059, Germany Published online: 07 Oct 2010.
- [23] I. Amdur and E. A. Mason, *Phys. Fluids* 1, 370 (1958).
- [24] EDUARDO F. LASCHUK, MA´RCIO M. MARTINS, STEFANO EVANGELISTI², *Ab Initio Potentials for Weakly Interacting Systems: Homonuclear Rare Gas Dimers*, DOI 10.1002/qua.10738
- [25] J.H. Dymond, E.B. Smith, *the Virial Coefficients of Pure Gases and Mixtures. A Critical Compilation* (Clarendon, Oxford, 1980).
- [26] A. Hutem, S. Boonchui, Numerical evaluation of second and third Virial coefficients of some inert gases via classical cluster expansion, *J Math Chem* (2012) 50:1262–1276 (2011).
- [27] Bo Song, Xiaopo Wang, Zhigang Liu, Recommended gas transport properties of argon at low density using Ab initio potential, *Molecular Simulation*, DOI: 10.1080/08927022.2014.1003296 (2015).

الملخص:

في هذا العمل ركزنا على الدراسة الكمومية للاصطدامات ذرتي الأرجون (Ar-Ar). بعد عرض موجز للمفاهيم العام للتصادم الذري الكمومي، قمنا في المرحلة الأولى، ببناء منحني الكمون (الطاقة الكامنة) الذي تقوم ذرتان على أساسه بحساب الموجة الشعاعية عدديا، وبالتالي نحدد عدديا العزم المداري الحركي وتحولات الطور.

على وجه الخصوص قمنا بتقييم جودة تصادم Ar-Ar المحتملة المبنية عن طريق حساب معاملات درجة الثانية لفرييل الكلاسيكي. أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها من هذه المعاملات توافقا جيدا مع جميع المراجع التي تم المقارنة بها.

في المرحلة الثانية، استخدمنا هذه المعطيات لحساب بعض الخصائص الحرارية لغاز الأرجون المخفف باستعمال طريقة تشابمان-إنسكوغ ثم قمنا بتوسيع الحسابات لتشمل تأثيرات السبين والتناظر. ثبت الاتفاق الجيد مع المقالات التي تم المقارنة بها.

Résumé:

Ce travail porté sur l'étude quantique des collisions atomiques où le cas de la collision de deux atomes d'argon a été développé. Après un bref exposé de la théorie quantique de la collision, nous avons, dans un premier temps, construit la courbe d'énergie potentielle le long de laquelle deux atomes calculent numériquement l'équation d'onde radiale et, par conséquent, déterminent numériquement, soit toute énergie E et tout moment cinétique orbital, déphasages.

En particulier, nous avons évalué la qualité du potentiel Ar-Ar construit en calculant le second coefficient du Viriel classique. Les résultats obtenus à partir de ces coefficients ont montré un bon accord, principalement à haute température, avec les valeurs déjà publiées.

Dans un second temps, nous avons utilisé ces déphasages pour déterminer quantitativement le coefficient de transport, gaz dilués formés d'Argon, par la méthode de Chapman-Enskog. Nos calculs ont été étendus pour inclure les effets de spin et de symétrie.

La concordance avec les résultats obtenus dans la littérature est démontrée.

Abstract:

This work focused on the quantum study of atomic collisions where the case of the collision of two argon atoms was developed. After a brief exposition of the quantum theory of collision, we have, in a first step, constructed the potential energy curve along which two atoms numerically calculate the radial wave equation and, consequently, determine numerically, or any energy E and any orbital kinetic moment, phase shifts.

In particular, we evaluated the quality of the potential Ar-Ar built by calculating the second coefficient of the classical virile. The results obtained from these coefficients showed good agreement, mainly at high temperatures, with the values already published.

In a second step, we used these diphas to quantitatively determine the transport coefficient, diluted gases formed of Argon, by the Chapman-Enskog method. Our calculations have been expanded to include spin and symmetry effects.

Agreement with results obtained from the literature is demonstrated