

# بررسی پخش در پتانسیل‌های همبسته تصادفی پایدار با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

احمدی برجی، مهدی<sup>۱</sup>؛ ندایی اسکویی، احسان<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه گوازننگ، زنجان

<sup>۲</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه گیلان، رشت

## چکیده

در این مقاله، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی لانه‌زینی، حرکت ذرات کلاسیکی روی سطوح تصادفی همبسته پایدار، مورد مطالعه قرار گرفته است. برای مدل کردن پتانسیل تصادفی این سطوح از توزیع  $fLm$  (حرکت براونی کسری) استفاده کردیم که یک توزیع تصادفی پایدار با همبستگی بلندبرد بوده و تعمیمی از حرکت براونی کسری ( $fBm$ ) می‌باشد. نتایج ما نشان می‌دهد که بسته به مقادیر دما، ضریب اصطکاک، زبری سطح و پایداری محیط، رژیم‌های پخش متفاوتی قابل مشاهده است که هم شامل پخش فیکسی است و هم رژیم‌های غیرعادی فرایخشی و فروپخشی. نشان می‌دهیم که نتایج محققین پیشین تنها حالت خاصی از این تحقیق بوده است.

## مقدمه

پخش اتم‌ها، مولکول‌ها و نانوذرات، روی سطوح بی‌نظم، مسائل مهمی در مورد ارتباط با مدل‌بندی بسیاری از پدیده‌های فیزیکی و طبیعی، و همچنین کاربرد آنها در فرآیندهای صنعتی بوجود آورده است. برخی کاربردها، شامل پخش مولکول‌های آلی روی سطح بافت‌های زیستی، رسانش از میان جامدات مرکب سطحی است. علاوه بر این، توزیع ارتفاع‌های سطح یک فیلم نازک، کمیتی تصادفی با همبستگی بسیار زیاد با تابع توزیع نزدیک به  $fBm$  است [۱]. تمام شبیه‌سازی‌های انجام شده برای پخش در این قبیل محیط‌ها شبیه‌سازی‌هایی از نوع گسسته بوده‌اند که برهمکنش ذره با سیال در نظر گرفته نشده بود و لذا میرایی در این فرآیندها وارد نشده بود در حالیکه در مسائل واقعی، ذرات معمولاً در یک سیال که می‌تواند آب، نفت و یا گاز باشد قرار دارند. ما برای مدل کردن این مسئله، از معادله‌ی لانه‌زینی استفاده کردیم که برهمکنش سیال با ذره‌ی غوطه‌ور در آن، در ترم اتلافی در نظر گرفته شده است. حرکت لوی کسری قابل تعمیم به حالت‌های ناهمسانگرد و ناپایدار بوده و علاوه بر این می‌توان از آن، توزیع‌هایی با همبستگی مثبت، منفی و یا بدون همبستگی (حرکت براونی معمولی) ایجاد کرد. بنابراین تحلیل ما محدوده وسیعی از فرآیندها را در بر می‌گیرد که دارای کاربردهای فراوانی نیز هستند.

## پتانسیل $fLm$ و شبیه‌سازی همبستگی محیط

ما در مدل‌سازی خود برای همبستگی‌های سیستم و همچنین برای به حساب آوردن نقص‌ها و ناخالصی‌ها، از توزیع کلی  $fLm$  که در آن پایداری سیستم قابل کنترل است، استفاده کرده‌ایم. این توزیع، خود-متناسب و پایدار بوده، و دارای

$$\langle [L_\alpha(t_2) - L_\alpha(t_1)]^\nu \rangle = \begin{cases} \frac{2\sigma^{\nu/\alpha}}{\pi\nu} (t_2 - t_1)^{\nu/\alpha} \sin\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \Gamma\left(1 - \frac{\nu}{\alpha}\right), & \nu < \alpha \leq 2 \\ \infty, & \nu \geq \alpha \end{cases} \quad \text{از روابط همبستگی‌های بلندبرد است و} \quad (1)$$

پیروی می‌کند.  $\alpha$  عددی بین ۰ و ۲ است و پایداری همبستگی‌های سیستم را نشان می‌دهد.  $\alpha = 2$  همان توزیع  $fBm$  است.  $H$  نمای هارست (زبری) سیستم بوده و یک عدد حقیقی در بازه‌ی  $[0, 1]$  است. این کمیت چگونگی همبستگی را تعیین می‌کند. مقدار  $H$  تعیین‌کننده نوع فرآیند  $fLm$  است. در  $H > 1/2$ ، افزایش‌ها به طور مثبت همبسته‌اند یعنی اگر قدم  $i$ ام افزایشی باشد، قدم  $i+1$ ام به احتمال بیشتری افزایشی است، و در  $H < 1/2$ ، به طور منفی همبسته‌اند یعنی اگر قدم  $i$ ام افزایشی باشد، قدم  $i+1$ ام به احتمال بیشتری کاهش‌ی است. در  $\alpha = 2$ ،  $H = 1/2$  مشخصه‌ی حرکت براونی معمولی است [۲ و ۳].

## الگوریتم و جزئیات شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی حرکت، از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی لانژوینی استفاده کرده‌ایم. معادله لانژوین حرکت برای یک ذره به جرم  $m$  به صورت زیر است

$$m \ddot{r}_d = -\frac{\partial V(r_d)}{\partial r_d} - \mu \dot{r}_d + \xi_d(t) \quad (2)$$

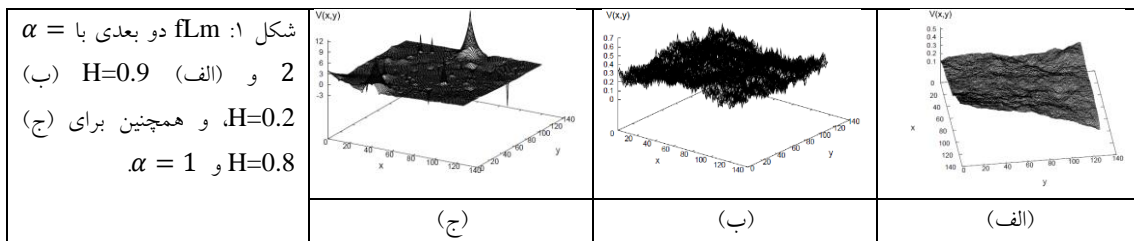
که در آن،  $r_d$  نماینده مکان  $x$  و  $y$ ، علامت نقطه نشان دهنده مشتق نسبت به زمان،  $V(r_d)$  پتانسیل محیط،  $\mu$  ضریب اصطکاک، و  $\xi_d$  نیروی تصادفی ناهمبسته‌ی نوفه‌ی سفید در جهت  $d$  است که از رابطه‌ی اتلاف افت و خیز

$$\langle \xi_d(t) \xi_{d'}(t') \rangle = 2\mu k_B T \delta_{dd'} \delta(t - t') \quad (3)$$

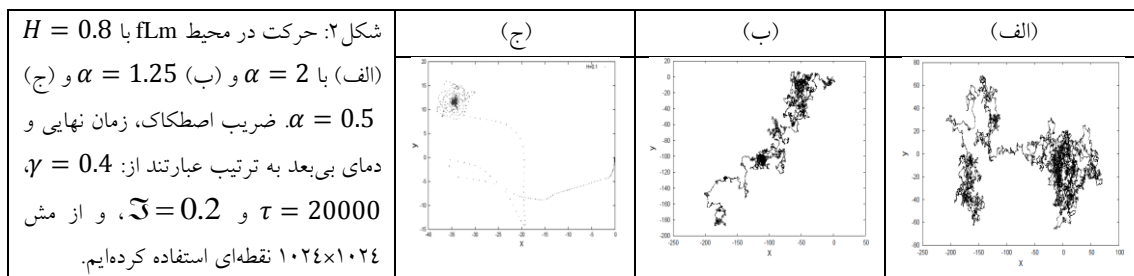
تبعیت می‌کند [4]. ما با استفاده از مش‌بندی سطح و مشتق‌گیری عددی به روش تفاضل محدود، نیروی وارد بر ذره در جهت‌های  $x$  و  $y$  محاسبه نمودیم، و از شرط مرزی تناوبی برای پتانسیل استفاده کرده و با استفاده از روش الگوریتم رونگه کوتای تصادفی مرتبه دوم [5] معادلات را حل نمودیم.

## نتایج و بحث و بررسی

برای شبیه‌سازی محیط fLm از تکنیک SRA استفاده کرده‌ایم [6]. چهار نمونه fLm دو بعدی، برای مقادیر مختلف زبری و پایداری در شکل (۱) نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود برای مقادیر بالای  $H$ ، شکل یک روند کلی افزایشی یا کاهش‌ی دارد ولی برای مقادیر کمتر، افزایش‌ها با یک کاهش همراهند. با کاهش  $\alpha$  چاه‌ها و قله‌هایی ظهور می‌کنند که عمق/ارتفاع و احتمال بوجود آمدن آنها با کاهش  $\alpha$  بیشتر می‌شود.

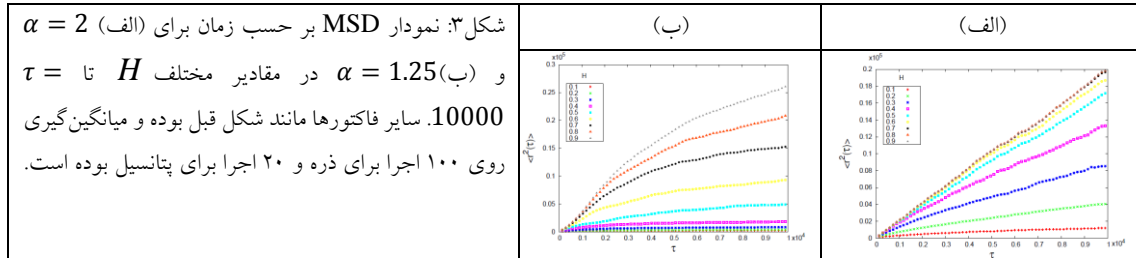


حرکت ذره در زبری‌های مختلف سطح، متفاوت است. اگر زبری زیاد باشد، ذره به طور مداوم در چاه‌های پتانسیل افتاده و تغییر جهت می‌دهد. اما اگر زبری کم باشد تغییر جهت ذره کمتر است. همچنین در شکل ۲ می‌بینیم که در ذره در مقادیر کمتر پایداری، در چاه‌ها فرورفته و به تله می‌افتد. همچنین به تفاوت مسافت میانگین طی شده در شکل‌ها دقت کنید.



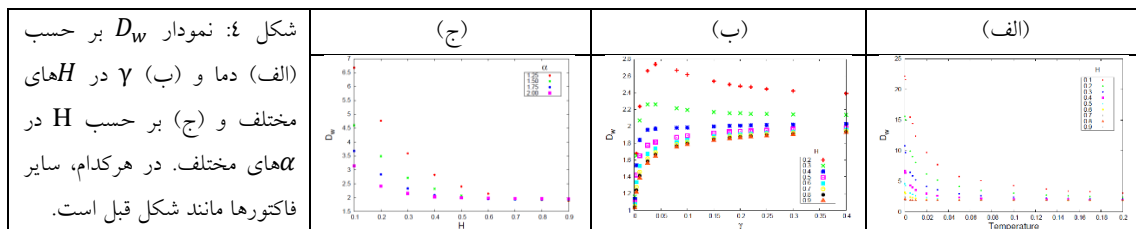
کمیتی آشنا که می‌توان برآورد کرد، میانگین مربع جابجایی (MSD) است. این کمیت، در رفتار پخش معمولی، یک رابطه‌ی خطی با زمان دارد ولی در پخش غیرعادی، بصورت  $\langle r^2(\tau) \rangle \sim \tau^{2/D_w}$  است. با توجه به طبیعت تصادفی محیط‌های بی‌نظم و نیروهای نوفه‌ی سفید، بین اجزای زیادی روی ذرات و پتانسیل‌ها میانگین‌گیری کرده‌ایم. نمودار MSD بر حسب زمان در شکل (۳) در دو پایداری متفاوت برای مقادیر مختلف  $H$  نشان داده شده است. همان‌طور که

مشاهده می‌کنید در  $\alpha = 2$ ، برای  $H < 1/2$ ، با افزایش  $H$  شیب نمودار افزایش می‌یابد اما برای  $H > 1/2$  افزایش  $H$  تاثیری در شیب نمودار ندارد؛ اما با کاهش  $\alpha$ ، تاثیر زبری های  $H > 1/2$  نیز نمایان می‌شود و نمودارها کاملاً از هم تفکیک می‌شوند. در این حالت اثر محیط‌های زبرتر روی رژیم پخش کاهش می‌یابد.



$D_w$  بعد فرکتالی قدم‌ها است که برای رژیم فروپخشی  $D_w < 2$ ، برای فروپخشی  $D_w > 2$ ، و برای پخش عادی  $D_w = 2$  است. در شکل (الف-۴) نمودار  $D_w$  بر حسب دما در  $\gamma = 0.4$  نشان داده شده است. در دمای پایین حرکت برای اکثر مقادیر  $H$  فروپخشی است اما با افزایش دما همگی به سمت حرکت فیکتی نزدیک می‌شوند. با این حال سطوح نرم‌تر تمایل به سمت فروپخشی را نشان می‌دهند. شکل (ب-۴) نمودار  $D_w$  بر حسب ضریب اصطکاک است که نشان می‌دهد با اصطکاک کم، صرف‌نظر از زبری یا نرمی سطح، حرکت همواره فروپخشی است. اما افزایش مقدار اصطکاک بسته به زبری سطح، می‌تواند حرکت را به رژیم فروپخشی نیز سوق دهد. با این حال، افزایش بیشتر اصطکاک، تمام حالت‌ها را به رژیم فیکتی می‌کشاند. در نهایت برای نمودار  $D_w$  بر حسب  $H$  در (ج-۴) می‌بینیم که افزایش پایداری سطح می‌تواند حرکت را از رژیم فروپخشی به فیکتی سوق دهد. هرچه پایداری کمتر باشد گیرافتادگی‌های ذره بیشتر شده و ذره مدت بیشتری در چاه‌ها به تله می‌افتد. این شکل به خوبی حرکت فیکتی را برای  $H > 1/2$  و فروپخشی را برای  $H < 1/2$  نشان می‌دهد.

در کار سهیمی و سعادت‌فر [۷]، گفته شده بود که زبری سطح هیچ تاثیری بر رژیم پخش ندارد. اما در این کار با مطالعه اثر زبری، پایداری، دما و اصطکاک نشان داده شد که تحقیق آنها تنها یک حالت خاص از کار ما بوده و هرکدام از این فاکتورها می‌تواند اثر مخصوص به خود را داشته باشد.



## مرجع‌ها

- [1] A.L.Barabasi, H.E.Stanley, Fractal Concepts in Surface Growth (Cambridge University Press, London, 1995).
- [2] N. Laskin, et al. Computer Networks, 40, 363, (2002)
- [3] W. Biao, et al. IEEE Transactions on Information Theory, 50, 6, (2004)
- [4] J.M. Sancho, et al. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 250601 (2004).
- [5] R. L. Honeycutt, *Phys. Rev. A* **45**, 600 (1992).
- [6] سید مهدی واعظ علایی و مهدی انصاری‌راد، مقاله‌نامه شانزدهمین سمینار ماده چگال دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، ۲۰۱۰.
- [7] M. Saadatfar and M. Sahimi, *Phys. Rev. E* **65**, 036116 (2002).