

# شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ذوب آلیاژ منظم و نامنظم Ag-Au

لیلا مهری<sup>۱</sup> و جمال داودی<sup>۲</sup>

۱- کارشناس ارشد، گروه فیزیک، دانشگاه زنجان

۲- استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه زنجان

jdavoodi@znu.ac.ir

## چکیده

فرآیند ذوب آلیاژ نامنظم Ag-X%Au و آلیاژهای دوتایی منظم Ag<sub>3</sub>Au و Au<sub>3</sub>Ag در مقیاس اتمی با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در این کار پژوهشی مورد بررسی قرار گرفته‌است. این شبیه‌سازی در هنگرد کانونیک (NPT) انجام شده‌است. برای محاسبه انرژی برهمکنشی و نیروی وارد بر ذرات طلا و نقره از پتانسیل ساتن-چن کوانتومی و برای حل معادلات دیفرانسیل جفت‌شده بین ذرات و محاسبه مسیرهای فضای فاز از روش سرعت ورله استفاده کرده‌ایم. با این تکنیک تغییرات دمای ذوب آلیاژ با تغییر درصد اتمهای طلا بررسی شد. علاوه بر آن کمیت‌های انرژی بستگی، گرمای نهان ذوب، ضریب انبساط حجمی، ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت، چگالی و پارامتر نظم برای آلیاژهای دوتایی منظم Ag<sub>3</sub>Au، Au<sub>3</sub>Ag و فلزات طلا، نقره و آلیاژهای نامنظم Ag-X%Au با درصدهای مختلف طلا در دماهای مختلف محاسبه گردید. نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی قابل دسترس توافق خوبی دارند.

## واژه‌های کلیدی:

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، آلیاژ Ag-Au، خواص گرمایی.

## ۱- مقدمه

دینامیک مولکولی، انتخاب پتانسیل برهمکنشی مناسب بین ذرات است. هر چه این پتانسیل، به پتانسیل واقعی بین ذرات نزدیک‌تر باشد در واقع مدل بهتری از واقعیت را ارائه می‌دهد [۲ و ۳]. این شبیه‌سازی در هنگرد کانونیک (فشار و دما ثابت) NPT انجام شده‌است. برای ثابت ماندن تعداد ذرات از شرایط مرزی دوره‌ای، برای کنترل دما از مقیاس‌بندی سرعت‌ها [۲] و برای کنترل فشار سیستم از روش برندنسن استفاده می‌کنیم [۴]. در روش برندنسن برای ثابت نگه‌داشتن فشار از تنظیم حجم استفاده می‌شود. در این روش، اضلاع جعبه شبیه‌سازی و

مطالعه گذار فاز و خواص گرمایی آلیاژهای فلزی و استخراج مقادیر عددی خواص گرمایی در دماهای مختلف به‌عنوان پایگاه داده‌ها جهت مصارف صنعتی بسیار ضروری به نظر می‌رسد. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از ابزارهای قوی برای بدست آوردن خصوصیات ماکروسکوپی و میکروسکوپی مواد است. به‌ویژه برای کمیت‌هایی که دستیابی به مقادیر تجربی آن‌ها در شرایط غیر متعارفی سخت است می‌توان از تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده کرد [۱]. اساس کار شبیه‌سازی

◊ نشان‌دهنده میانگین گیری زمانی،  $\rho$  چگالی ذرات و  $r_{ij}$ ، فاصله بین اتم‌های  $i$  و  $j$  است. اگر میانگین گیری زمانی در طول  $M$  گام صورت گیرد، برای تابع توزیع شعاعی داریم:

$$g(r) = \frac{\sum_{k=1}^M N_k(r, \Delta r)}{\frac{N}{2} M \rho V(r, \Delta r)} \quad (4)$$

$V(r, \Delta r)$  حجم بین پوسته‌های کروی به شعاع  $r$  و  $r + \Delta r$  را نشان می‌دهد و  $N_K(r, \Delta r)$  عملگر شمارش در گام زمانی  $t_k$  است.

## ۲- تابع انرژی پتانسیل

برای محاسبه نیروی بین اتم‌ها از پتانسیل ساتن-چن کوانتومی استفاده شده است. این پتانسیل از نوع پتانسیل‌های بستگی قوی است که برای توصیف انرژی عناصر فلزی با ساختار مکعبی مرکز سطحی (FCC) معرفی شده است. از این پتانسیل برای محاسبه انرژی و نیرو در خوشه‌های فلزی و ویژگی‌های ساختاری آن‌ها استفاده شده است. شکل کلی این پتانسیل از رابطه (۵) محاسبه می‌شود [۵]:

$$U_{tot}^{sc} = \sum_i \left[ \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} V(r_{ij}) - c_i \varepsilon_{ii} \sqrt{\rho_i} \right] \quad (5)$$

$$\phi(r_{ij}) = \left( \frac{A_{ij}}{r_{ij}} \right)^{n_{ij}} \quad (6)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij}) = \sum_{j \neq i} \left( \frac{A_{ij}}{r_{ij}} \right)^{m_{ij}} \quad (7)$$

ثابت‌های پتانسیل در جدول (۱) ارائه شده است [۶]:

جدول (۱): پارامترهای پتانسیل ساتن-چن کوانتومی.

پارامتر	Ag	Au	Ag-Au
$n$	۱۱	۱۱	۱۱
$m$	۶	۸	۷
$\varepsilon$ (ev)	۰/۰۰۳۹۴	۰/۰۰۷۸۰	۰/۰۰۵۵۴
$C$	۹۶/۵۲۴	۵۳/۵۸۱	۷۵/۰۵۲
$A$ (Å)	۴/۰۶۹۱	۴/۰۶۵۱	۴/۰۶۷۰

مختصات مکانی ذرات را در هر گام زمانی تعادلی در ضریب تنظیم که متناسب با فشار کل است ضرب می‌کنیم و در پایان مرحله متعادل‌سازی سیستم، مقدار میانگین حجم را محاسبه می‌کنیم. بدین منظور ابتدا فشار کل از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲]:

$$P_{tot} = \frac{2N}{3V} \langle E_k \rangle + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_i \sum_{i < j} \vec{F}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \right\rangle \quad (1)$$

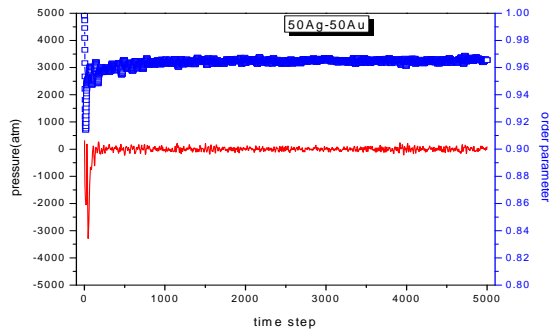
$F_{ij}$  و  $r_{ij}$  به ترتیب نیرو و فاصله بین دو ذره  $i$  و  $j$  انرژی جنبشی،  $V$  حجم و  $N$  تعداد کل ذرات تشکیل آلیاژ می‌باشند. جمله اول فشار ناشی از حرکت اتم‌ها (فشار جنبشی) و جمله دوم ناشی از برهمکنش بین ذرات (فشار ویریال) می‌باشد. ضریب تنظیم حجم جعبه شیشه‌سازی از رابطه (۲) بدست می‌آید.

$$\xi = \left[ 1 + \frac{DT}{QP} * (P - P_0) \right]^{1/3} \quad (2)$$

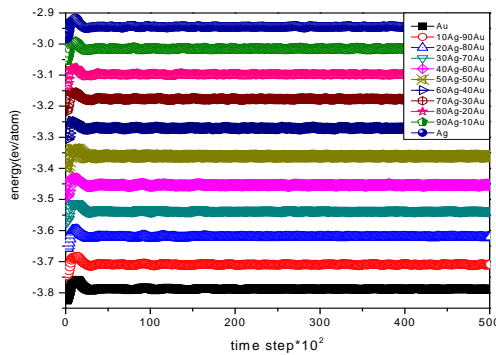
$P$  فشار لحظه‌ای کل بدست آمده در هر گام زمانی،  $P_0$  فشار مورد نظر برای شیشه‌سازی،  $DT$  گام زمانی و  $QP$  زمان واهلش سیستم و از مرتبه گام زمانی است.

یکی از کمیت‌های مهم برای تعیین ساختار سیستم، تابع توزیع شعاعی است که ساختار موضعی و نظم اتم‌ها را نسبت به یکدیگر مشخص می‌کند و به‌دما و چگالی سیستم وابسته است. تابع توزیع شعاعی در صفر کلویین یک سری توابع دلتای دیراک است که ساختار داخلی بلور را نشان می‌دهند. در دماهای غیر صفر کلویین این تابع به تابع گاوسی تیز تبدیل می‌شود که دلیل آن افت و خیزهای گرمایی می‌باشد. این توابع دلتا یا گاوسی به‌خوبی نشان می‌دهند که چگالی موضعی در ساختارهای بلوری ثابت نیست و دارای تغییرات شدیدی است. در فاز مایع ساختار بلوری کاملاً از بین رفته و تابع توزیع شعاعی کاملاً پیوسته می‌شود. تنها یک قله در ابتدای منحنی که ناشی از نظم کوتاه برد در فاصله تقریباً یک قطر اتمی است دیده می‌شود. این تابع برای یک سیستم  $N$  ذره‌ای با حجم  $V$  عبارت است از [۲]:

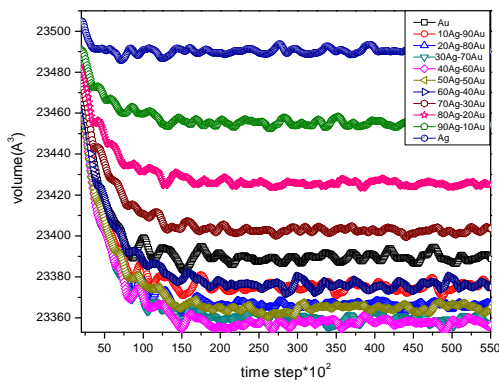
$$g(\vec{r}) = \frac{1}{\rho N} \left\langle \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij}) \right\rangle \quad (3)$$



(الف)



(ب)



(ج)

شکل (۱): نمودارهای تعادلی آلیاژهای Ag-x%Au، فشار و پارامتر نظم،

(ب) انرژی و (ج) حجم بر حسب گام زمانی.

$r_{ij}$  فاصله بین اتم‌های  $i$  و  $j$  یک پارامتر بدون بعد مثبت،  $\epsilon$  پارامتری با بعد انرژی،  $n$  و  $m$  مقادیر ثابت و  $A$  ثابت پتانسیل که پارامتری با بعد طول است. ثابت‌های این پتانسیل برای کاربرد در آلیاژها از روابط زیر محاسبه می‌شوند [۷]:

$$n_{ij} = \frac{n_i + n_j}{2} \quad (۸)$$

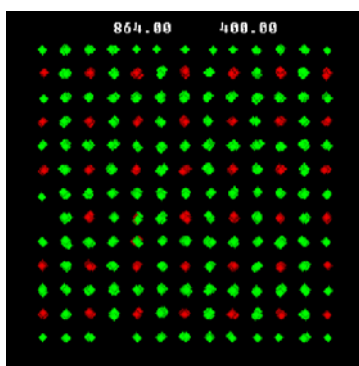
$$m_{ij} = \frac{m_i + m_j}{2} \quad (۹)$$

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (۱۰)$$

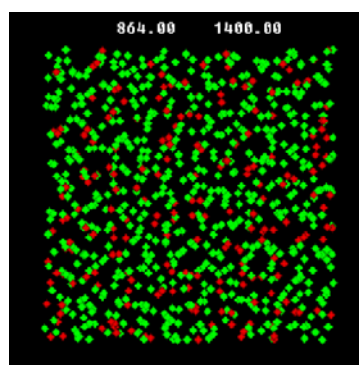
$$A_{ij} = \sqrt{A_i A_j} \quad (۱۱)$$

### ۳- جزئیات شبیه‌سازی

ابتدا آرایش اولیه بلور Ag-X%Au (x درصد اتمهای طلا در آلیاژ) با چیدمان  $4n^3$  اتم Ag و Au به‌طور تصادفی روی یک شبکه مکعبی FCC با درصد‌های مختلف Au تولید می‌شود و برای آلیاژ منظم  $Ag_3Au$  اتم‌های Ag روی وجوه مکعب و اتم‌های Au روی رئوس مکعب و برای آلیاژ  $Au_3Ag$  برعکس  $Ag_3Au$  اتم‌ها را در ساختار fcc می‌چینیم. جعبه شبیه‌سازی آلیاژهای منظم از ۸۶۴ ذره و آلیاژهای نامنظم از ۱۳۷۲ ذره تشکیل شده و گام زمانی شبیه‌سازی در حد ۱۷/۲ فمتو ثانیه است. تعداد گام زمانی برای رسیدن به تعادل اولیه سیستم ۵۰۰۰ است. دمای اولیه سیستم را ۳۰۰ کلوین در نظر می‌گیریم. ابتدا به‌ذرات سرعتی تصادفی متناسب با دمای سیستم می‌دهیم و با ثابت نگاه‌داشتن مرکز جرم سیستم، معادلات حرکت را با روش سرعت ورله حل می‌کنیم [۸]. سپس سیستم مورد نظر را در دمای مذکور به تعادل ترمودینامیکی می‌رسانیم. افت و خیز کمیت‌های فیزیکی همانند فشار، پارامتر نظم، انرژی و حجم بر حسب گام زمانی حول یک مقدار ثابت نشان‌دهنده به تعادل رسیدن سیستم می‌باشد. برای نشان دادن به تعادل رسیدن سیستم منحنی تغییرات فشار، پارامتر نظم، انرژی و حجم مربوط به آلیاژهای Ag-X%Au را بر حسب گام زمانی شبیه‌سازی در شکل (۱) و آلیاژهای  $Ag_3Au$  و  $Au_3Ag$  را در شکل (۲) نشان داده‌ایم.

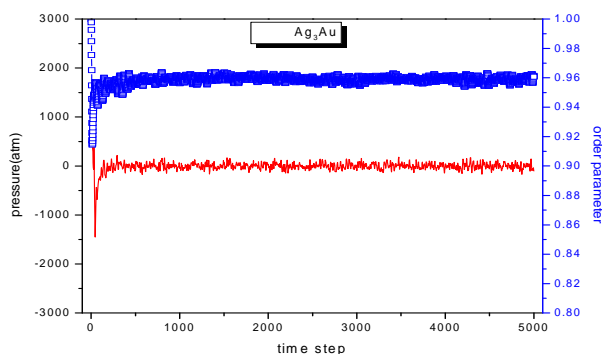


(الف)

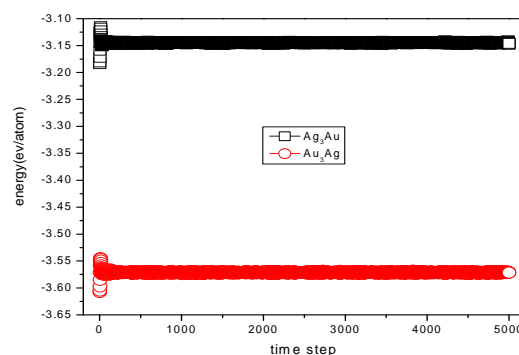


(ب)

شکل (۳): ساختار آلیاژ  $Au_3Ag$  شامل ۸۶۴ ذره در فاز جامد و مایع در فرآیند ذوب در دماهای، الف) ۴۰۰ K، ب) ۱۶۰۰ K (نقاط پررنگ اتمهای Ag و کم رنگ اتمهای Au می‌باشند).



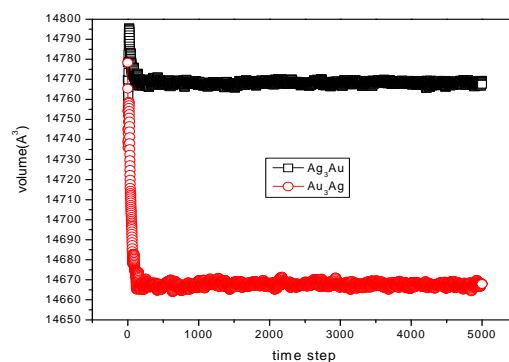
(الف)



(ب)

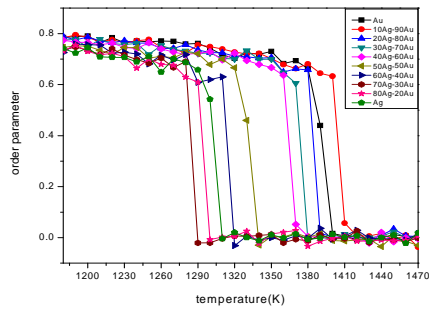
بعد از تعادل برای ذوب سیستم لازم بود که دمای بلور را افزایش دهیم، لذا دما را به اندازه ۰/۰۱ کلوین افزایش داده و دوباره سیستم را به تعادل می‌رساندیم تا دمای سیستم از ۳۰۰ به ۱۶۰۰ کلوین افزایش یافته و آلیاژ ذوب شود (شکل ۳ و ۴). برای آشکارسازی ذوب سیستم نمودارهای پارامتر نظم، انرژی، حجم و چگالی بر حسب دما برای آلیاژهای  $Ag-X\%Au$  در شکل (۵) و برای آلیاژ  $Ag_3Au$  و  $Au_3Ag$  در شکل (۶) رسم شده‌اند.

همانطور که انتظار می‌رود در شکل‌های (۵) و (۶) کمیت پارامتر نظم که معیاری برای سنجش نظم سیستم است در حالت جامد تقریباً حول مقدار مثبت و در حالت مایع حول صفر نوسان

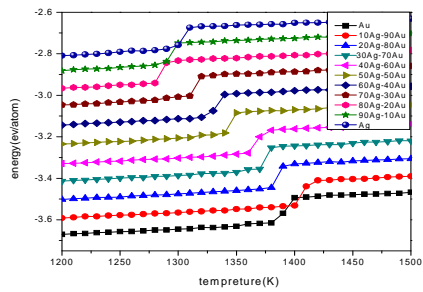


(ج)

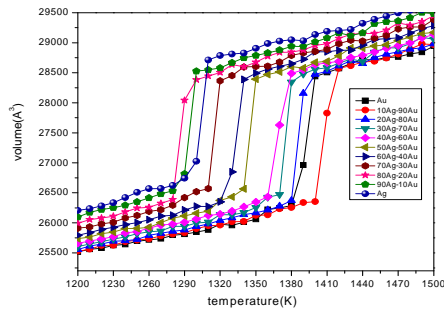
شکل (۲): نمودارهای تعادلی آلیاژهای منظم  $Au_3Ag$  و  $Ag_3Au$ ، الف) فشار و پارامتر نظم، ب) انرژی و ج) حجم بر حسب گام زمانی.



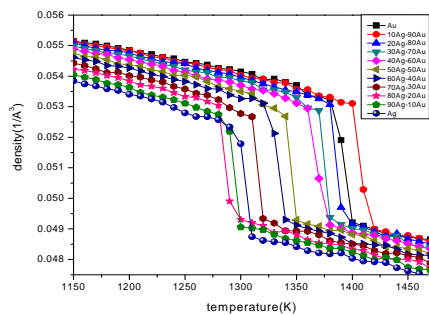
(الف)



(ب)

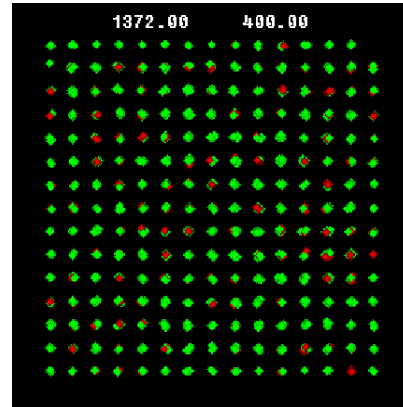


(ج)

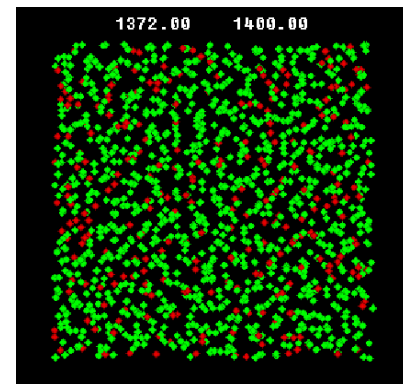


(د)

شکل (۵): نمودارهای چگالی بر حسب دما برای ذوب Ag-X%Au، (الف) پارامتر نظم، (ب) انرژی، (ج) حجم و (د) چگالی بر حسب دما.



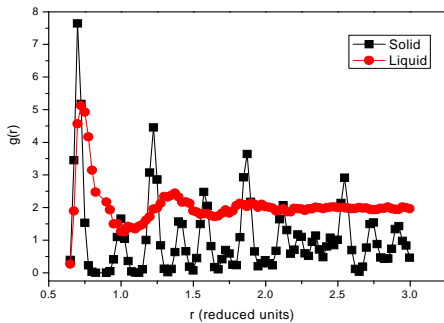
(الف)



(ب)

شکل (۴): ساختار آلیاژ 80%Ag شامل ۱۳۷۲ ذره در فاز جامد و مایع در فرآیند ذوب در دماهای (الف) ۴۰۰ K، (ب) ۱۴۰۰ K (نقاط پررنگ آتمهای Au و کم رنگ آتمهای Ag می‌باشند).

می‌کند. انرژی و حجم سیستم با افزایش دما افزایش یافته و در مرحله گذار فاز یک جهش ناگهانی پیدا می‌کند. چگالی هم با افزایش دما کاهش یافته و در مرحله ذوب یک تغییر ناگهانی دارد. همه این نمودارها نشان‌دهنده ذوب شدن سیستم می‌باشند. تابع توزیع شعاعی نیز قبل و بعد از ذوب بر حسب  $r$  در شکل (۷) رسم شده‌است که گذار فاز از جامد به مایع را نشان می‌دهد. می‌توان از روی نمودارهای حجم بر حسب دما، ضریب انبساط حجمی، انرژی بر حسب دما گرمای نهان ذوب و ظرفیت گرمایی آلیاژ را در فشار ثابت محاسبه کرد.



شکل (۷): تابع توزیع شعاعی طلا در فاز جامد و مایع.

#### ۴- نتایج شبیه‌سازی

تغییرات حجم بر حسب دما در شکل‌های (۳-ج) و (۴-ج) را با یک تابع درجه دو در محدوده دمایی ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ کلوین طبق رابطه (۱۲) برازش می‌کنیم.

$$V(T) = a + bT + cT^2 \quad (12)$$

ضریب انبساط حجمی با استفاده از رابطه (۱۳) محاسبه می‌شود.

$$\alpha_p(T) = \frac{1}{V(T)} \left[ \frac{\partial V(T)}{\partial T} \right]_p \quad (13)$$

ضرایب ثابت تابع چند جمله‌ای (۱۲) و ضرایب انبساط حجمی برای آلیاژهای Ag-x%Au در جدول (۲) گزارش شده‌است. نمودارهای انرژی بدست آمده از شکل (۳-ب) و (۴-ب) را در محدوده دمایی ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ کلوین با تابع درجه دو بر حسب دما برازش کرده و با توجه به اینکه در فشار صفر، آنتالپی با انرژی برابر است، بنابراین می‌توان گرمای ویژه در فشار ثابت به شکل زیر محاسبه کرد:

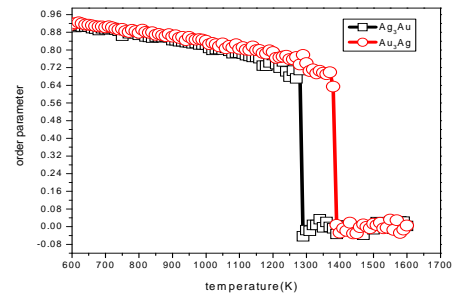
$$H(T) = E(T) + PV \quad (14)$$

$$E(T) = a + bT + cT^2 \quad (15)$$

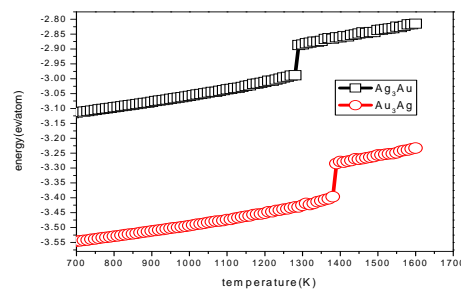
$$C_p = \left( \frac{\partial H(T)}{\partial T} \right)_p = \frac{\partial E(T)}{\partial T} \quad (16)$$

$$C_p = b + 2cT \quad (17)$$

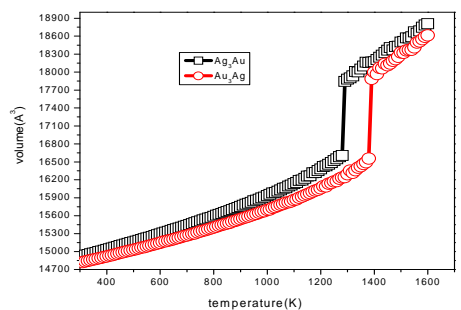
ضرایب تابع (۱۵) و ظرفیت گرمایی در فشار ثابت در جدول (۳) ثبت شده‌است.



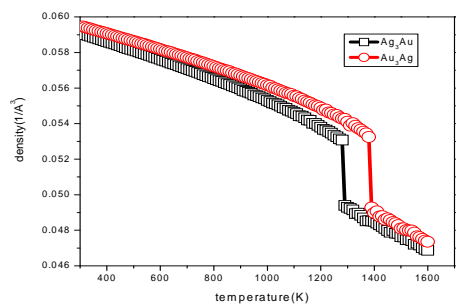
(الف)



(ب)



(ج)



(د)

شکل (۶): نمودارهای چگالی بر حسب دما برای ذوب آلیاژهای Ag<sub>3</sub>Au و Au<sub>3</sub>Ag، (الف) پارامتر نظم، (ب) انرژی، (ج) حجم و (د) چگالی بر حسب دما.

جدول (۲): ضرایب تابع  $V(T)$  و ضریب انبساط حجمی آلیاژهای Ag-Au.

مواد	$a(\text{Å}^3)$	$b(\text{Å}^3/\text{K})$	$c(\text{Å}^3/\text{K}^2)$	$\alpha \times 10^{-5} (\text{K}^{-1})$ (MD) (exp.)
Au	۰/۰۰۰۶۵	۱/۰۷	۲۳۲۵۲	۵/۳۷ ۴/۲۶
Ag-90%Au	۰/۰۰۰۶۶	۱/۰۸	۲۳۲۳۴	۶/۲۷
Ag-80%Au	۰/۰۰۰۶۹	۱/۰۹	۲۳۲۲۰	۶/۳۸
Ag-70%Au	۰/۰۰۰۷۱	۱/۱۰	۲۳۲۰۷	۶/۵۰
Ag-60%Au	۰/۰۰۰۷۹	۱/۱۵	۲۳۲۰۴	۶/۸۹
Ag-50%Au	۰/۰۰۰۷۵	۱/۱۴	۲۳۱۹۶	۶/۷۹
Ag-40%Au	۰/۰۰۰۷۳	۱/۱۲	۲۳۱۹۶	۶/۶۱
Ag-30%Au	۰/۰۰۰۸۵	۱/۱۵	۲۳۲۲۵	۷/۰۵
Ag-20%Au	۰/۰۰۰۸۷	۱/۱۸	۲۳۲۳۷	۷/۲۳
Ag-10%Au	۰/۰۰۰۸۹	۱/۲۳	۲۳۲۵۲	۷/۴۶
Ag	۰/۰۰۰۹۴	۱/۲۲	۲۳۲۸۷	۷/۵۶ ۵/۶۷
$\text{Au}_3\text{Ag}$	۰/۰۰۰۴۲	۰/۶۹	۱۴۵۷۲	۶/۴۳
$\text{Ag}_3\text{Au}$	۰/۰۰۰۵۴	۰/۷۳	۱۴۶۵۴	۷/۱۳

 جدول (۳): ضرایب تابع  $E(T)$  و ظرفیت گرمایی  $C_p$  آلیاژهای Ag-Au در فشار ثابت.

مواد	$a(\text{ev})$ $\times 10^{-8}$	$b\left(\frac{\text{ev}}{\text{atom.K}}\right)$	$c\left(\frac{\text{ev}}{\text{atom.K}^2}\right)$	$C_p \times 10^{-6}$ (MD) (exp.)
Au	۳/۸۳	۰/۰۰۰۲۴	-۳/۸۶	۲۶۵/۹۲ ۲۶۳/۸۱
Ag-90%Au	۳/۸۸	۰/۰۰۰۲۴	-۳/۷۸	۲۶۵/۲۸
Ag-80%Au	۳/۸۶	۰/۰۰۰۲۴	-۳/۶۹	۲۴۶/۸۶
Ag-70%Au	۴/۰۵	۰/۰۰۰۲۴	-۳/۶۱	۲۶۵/۳۲
Ag-60%Au	۴/۲۱	۰/۰۰۰۲۴	-۳/۳۴	۲۶۵/۲۲
Ag-50%Au	۴/۰۹	۰/۰۰۰۲۴	-۳/۴۳	۲۶۴/۶۱
Ag-40%Au	۴/۰۴	۰/۰۰۰۲۴	-۳/۵۲	۲۶۸/۲۱
Ag-30%Au	۴/۸۴	۰/۰۰۰۲۳	-۳/۲۴	۲۶۶/۶۳
Ag-20%Au	۴/۴۸	۰/۰۰۰۲۳	-۳/۱۶	۲۶۵/۹۴
Ag-10%Au	۴/۵۵	۰/۰۰۰۲۳	-۳/۰۸	۲۶۶/۱۹
Ag	۴/۸۱	۰/۰۰۰۲۳	-۳/۰۱	۲۶۴/۸۱ ۲۶۳/۶۲
$\text{Au}_3\text{Ag}$	۳/۶۸	۰/۰۰۰۲۴	-۳/۶۴	۲۶۶/۰۸
$\text{Ag}_3\text{Au}$	۴/۶۷	۰/۰۰۰۲۳	-۳/۲۱	۲۶۶/۰۷

جدول (۴): مقادیر شبیه‌سازی و تجربی دمای ذوب ( $T_m$ )، انرژی بستگی (E) و گرمای نهان (Q) آلیاژ Ag-Au.

مواد	$T_m(K)$ (MD) (exp.)	E(ev/atom) (MD) (exp.)	Q(ev) (MD) (exp.)
Au	۱۳۸۰	-۳/۸۰	۰/۱۲۵
	۱۳۳۷	-۳/۸۱	۰/۱۳۱
Ag-90%Au	۱۴۰۰	-۳/۷۱	۰/۱۳۱
Ag-80%Au	۱۳۸۰	-۳/۶۲	۰/۱۱۲
Ag-70%Au	۱۳۷۰	-۳/۵۲	۰/۱۰۴
Ag-60%Au	۱۳۶۰	-۳/۴۵	۰/۱۰۲
Ag-50%Au	۱۳۴۰	-۳/۳۶	۰/۱۱۳
Ag-40%Au	۱۳۳۰	-۳/۲۷	۰/۱۲۲
Ag-30%Au	۱۳۱۰	-۳/۱۷	۰/۱۰۲
Ag-20%Au	۱۲۸۰	-۳/۱۰	۰/۱۱۲
Ag-10%Au	۱۲۹۰	-۳/۰۲	۰/۱۰۴
Ag	۱۳۰۰	-۲/۹۴	۰/۰۸۸
	۱۲۳۵	-۲/۹۵	۰/۰۹۸
Au <sub>3</sub> Ag	۱۳۸۰	-۳/۵۷	۰/۱۱۲
Ag <sub>3</sub> Au	۱۲۸۰	-۳/۱۵	۰/۱۰۳

## ۶- مراجع

- [1] L. Wang, X. Bain and J. Hang, "Structural Simulation of Amorphization and Crystallization in Liquid Metals", J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys, Vol. 35, pp. 3575-3582, 2002.
- [2] J. M. Haile, Molecular Dynamics Simulation, pp. 189-194, John Wiley & Sons, New York, 1992.
- [3] D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation from Algorithms to Application, pp. 67-69, Academic Press, New York, 2002.
- [4] M. P. Allen and D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, pp. 232-239, Oxford University Press, New York, 1992.
- [5] A. P. Sutton and J. Chen, "Long-Rang Finnis-Sinclair Potentials", Phil. Mag. Lett. 61, pp. 139-164, 1990.
- [6] Y. Qi, T. Çağın, Y. Kimura and W. A. Goddard III, "Molecular Dynamics Simulations of Glass Formation and Crystallization in Binary Liquid Metals: Cu-Ag and Cu-Ni", Phys. Rev. B 59, pp. 3527-3533, 1999.
- [7] S. Kazanc, "Molecular Dynamics Study of Pressure Effect on Crystallization Behaviour of Amorphous CuNi Alloy During Isothermal Annealing", Physics Letters A 365, pp. 473-477, 2007.
- [8] L. Verlet, "Computer Experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules", Phys. Rev. 159, pp. 98-103, 1967.
- [9] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, Eighth ed., pp. 50-51, John Wiley & Sons, New York, 2005.

دمای ذوب، انرژی بستگی و گرمای نهان ذوب حاصل از شبیه‌سازی و مقادیر تجربی [۹] را برای آلیاژ Ag-Au در جدول (۴) گزارش کرده‌ایم.

با مقایسه مقادیر تجربی و شبیه‌سازی مشاهده می‌شود که توافق خوبی بین آنها وجود دارد که این هم نشان‌دهنده دقیق بودن روش شبیه‌سازی و پتانسیل برهمکنشی و صحت نتایج است.

## ۵- نتیجه‌گیری

در این پژوهش گذار فاز آلیاژ Ag-Au با استفاده از تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در هنگرد NPT مورد مطالعه قرار گرفت و خواص فیزیکی نظیر نقطه ذوب، انرژی بستگی، گرمای نهان ذوب، وابستگی دمایی ضریب انبساط حجمی و ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت برای آلیاژهای منظم و نامنظم Ag-Au محاسبه شده‌است. نتایج به‌دست آمده برای فلزات طلا و نقره توافق خوبی با مقادیر تجربی دارند که دلیل بر دقیق بودن نتایج شبیه‌سازی است.