

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский
государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Физический факультет

Кафедра информационных технологий
в физических исследованиях

Исследование распределения по скоростям молекул
двумерного идеального газа
Отчет по вычислительной лабораторной работе

Выполнили студенты 05192м гр.
Андреев А. Н.
Евсиков М. С.

Проверил доц. каф. ИТФИ
к.ф.-м.н. Васин А. С.

Нижний Новгород

2019

Содержание

Постановка задачи.....	3
Физическая модель.....	Ошибка! Закладка не определена.
Математическая модель	3
Алгоритм работы программы:	5
Практическая часть:	6
Выводы	8
Список литературы	8

Постановка задачи

Применить метод молекулярной динамики с потенциалом Леннарда-Джонса при исследовании распределения по скоростям молекул двумерного идеального газа.

Цель работы

Смоделировать движение молекул идеального газа в расчетной ячейке с периодическими граничными условиями.

1. Подобрать число частиц N и температуру системы (начальные скорости частиц).
2. Проследить поведение системы, выводя на экран «мгновенные снимки», среднюю кинетическую, потенциальную и полную энергии частиц на каждом шаге.
3. Исследовать распределение по скоростям молекул двумерного идеального газа для разных начальных температур.

Физическая модель

Расчетная ячейка задается квадратной формы размером

$$Lx = Ly = 30a, \quad (1)$$

где a – параметр модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (равновесное расстояние между частицами).

Модифицированный потенциал Леннарда-Джонса описывается следующей формулой:

$$U(r) = 4 * \varepsilon * \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) * K(r), \quad (2)$$

где $\varepsilon = D$ – модуль потенциальной энергии взаимодействия между атомами при равновесии. Для атомов аргона $D = 0.0103$ эВ.
 $\sigma = \frac{r_0}{\sqrt[6]{2}}$ – расстояние между центрами атомов, при котором $U(\sigma) = 0$,
 $r_0 = a$ – равновесное расстояние.

График зависимости потенциальной энергии от расстояния приведен на рис. 1.

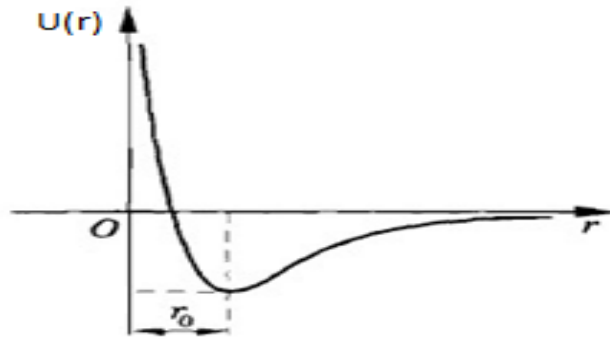


Рис. 1. Зависимость потенциальной энергии системы двух частиц от расстояния между ними

$K(r)$ – обрезающий множитель, вычисляемый по формуле:

$$K(r) = \begin{cases} 1, & \text{при } r \geq r_1, \\ \left[1 - \left(\frac{r-r_1}{r_1-r_2}\right)^2\right]^2, & \text{при } r_1 \leq r \leq r_2, \\ 0, & \text{при } r \geq r_2. \end{cases} \quad (3)$$

$r_1 = (1.1 \div 1.2) * r_0$, радиус обреза $r_2 = (1.7 \div 1.8) * r_0$.

Математическая модель

Расчет координат и скоростей для всех N частиц на текущем шаге по времени выполняется по алгоритму Верле в скоростной форме:

$$(x_i^j)_{k+1} = (x_i^j)_k + (V_i^j)_k \Delta t + \frac{(F_i^j)_k}{2m} (\Delta t)^2, \quad (4)$$

$$(V_i^j)_{k+1} = (V_i^j)_k + \frac{(F_i^j)_{k+1} + (F_i^j)_k}{2m} \Delta t, \quad (5)$$

где $k = 1, 2, \dots, k_{max}$ – номер шага по времени, $i = 1, 2, \dots, N$. $j = 1, 2$ – номер координаты на плоскости (1 – x, 2 – y), Δt – величина шага по времени, m – масса частицы, F_i^j – j -ая проекция силы, действующей на i -ую частицу стороны всех других частиц. $(F_i^j)_{k+1}$ вычисляется на каждом временном шаге после определения $(x_i^j)_{k+1}$.

Силы рассчитываются по формуле (6):

$$(F_i^j)_k = - \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i^j} \right)_k \quad (6)$$

В случае простых потенциалов межатомного взаимодействия, такие как потенциал Леннарда-Джонса, частные производные могут быть вычислены следующим образом:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i^j} = -12D * r_0^6 \sum_k \left[\frac{r_0^6}{r_{(ik)}^6} - 1 \right] * \frac{x_i^j - x_k^j}{r_{(ik)}^8}, \quad (7)$$

где $r_{(ik)}^2 = (x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2$ – квадрат расстояния между центрами i -ого и k -ого атомов.

Один из важнейших параметров нашей системы – шаг по времени. Его следует выбирать как $(0.01 \div 0.02)\tau$, где $\tau \approx \left(\frac{ma^2}{D}\right)^{1/2} \approx 2 * 10^{-12}c$ – характерное время системы.

Алгоритм работы программы:

1. Задается количество частиц N в расчетной ячейке и количество шагов по времени, за которые будет исследоваться система.
2. Задается шаг по времени в долях τ .
3. Задается максимальная скорость частиц v_{0max} (вычисляемая из начальной температуры системы). Скорости всех частиц задаются случайно по алгоритму

$$\begin{aligned} v_{0x} &= (-1 + 2 * r_1) * v_{0max}, \\ v_{0y} &= (-1 + 2 * r_2) * v_{0max}, \end{aligned}$$

где r_1 и r_2 – равномерно распределенные случайные числа из интервала $[0,1]$.

4. Генерируется начальное состояние и происходит расчет координат и скоростей на каждом шаге.

На рис. 2. представлен интерфейс программы.

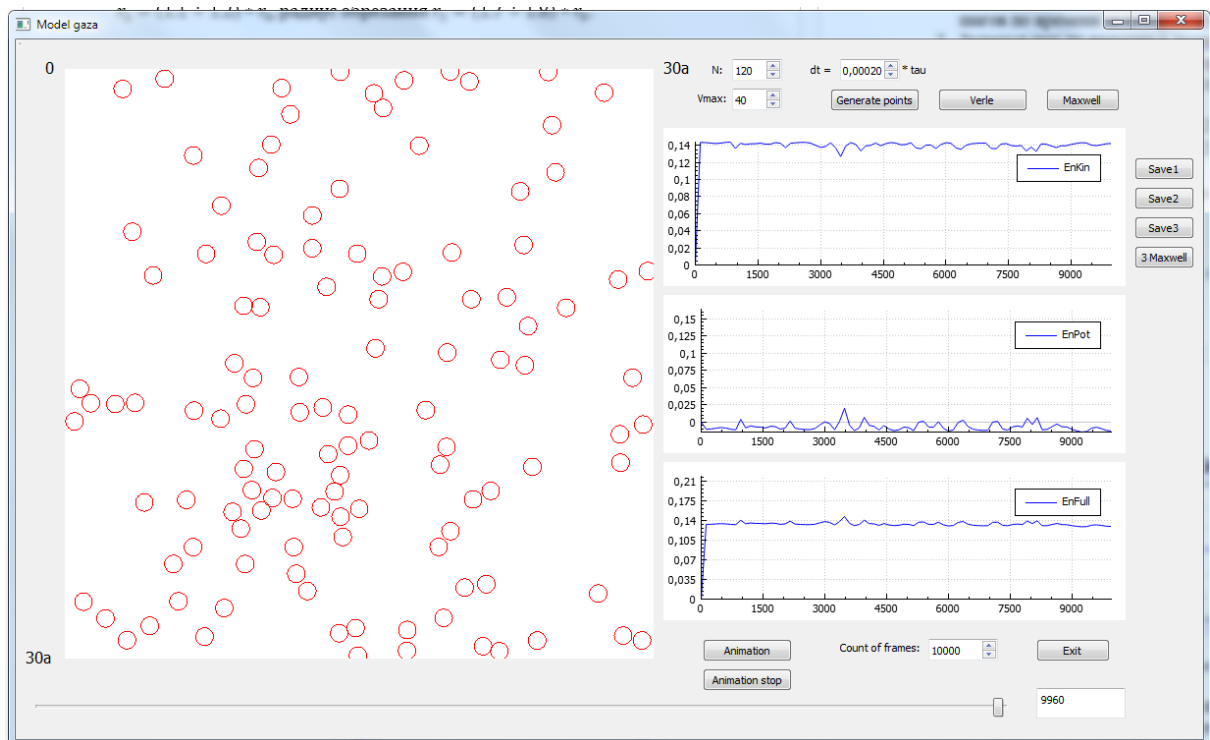


Рис.2. Интерфейс программы

Практическая часть:

Для сохранения числа движущихся частиц в расчетной ячейке необходимо обеспечить выполнение периодических граничных условий.

Корректность работы программы определяется выполнением закона сохранения полной энергии: при усреднении по каждому 50÷100 шагам по времени сумма кинетической и потенциальной энергии движущихся частиц должна оставаться постоянной с точностью в несколько процентов.

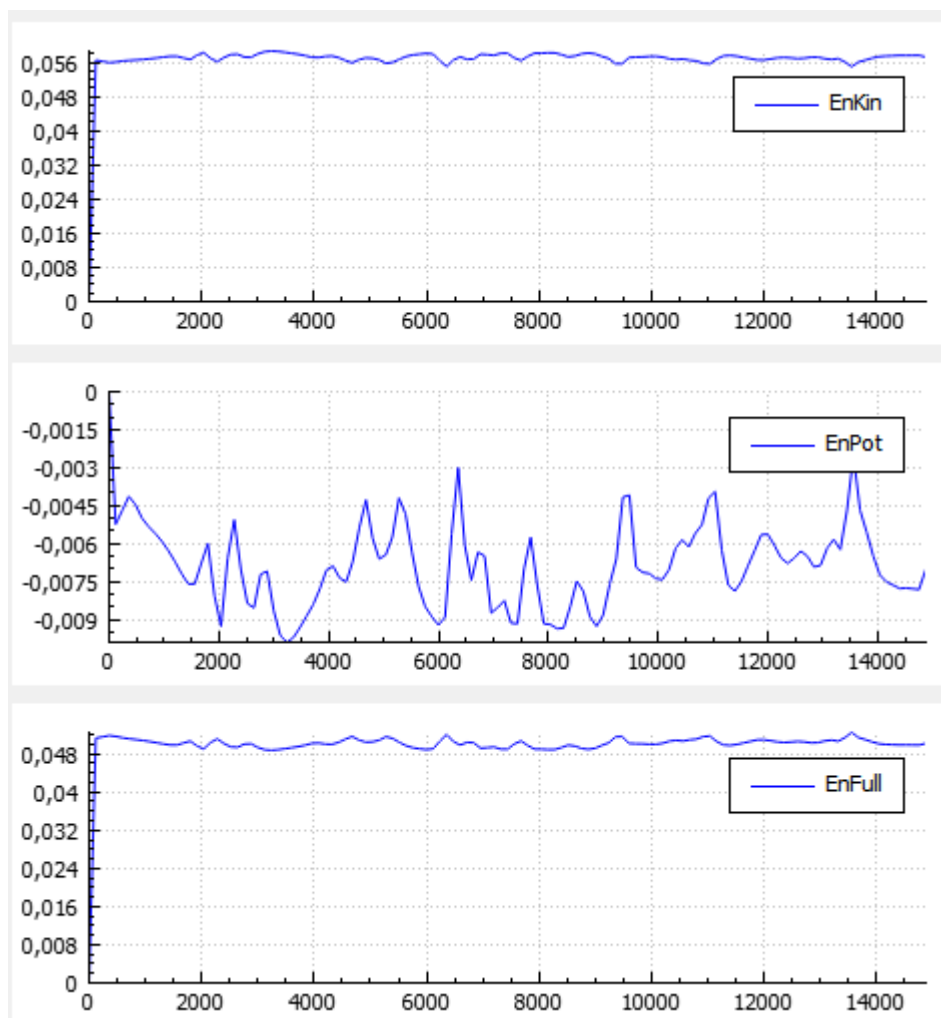


Рис. 3. Графики кинетической, потенциальной и полной энергии системы к 15000-ому шагу по времени.

На рис. 4. продемонстрирован «снимок» системы на 5000 шаге по времени при начальной скорости 360 м/с.

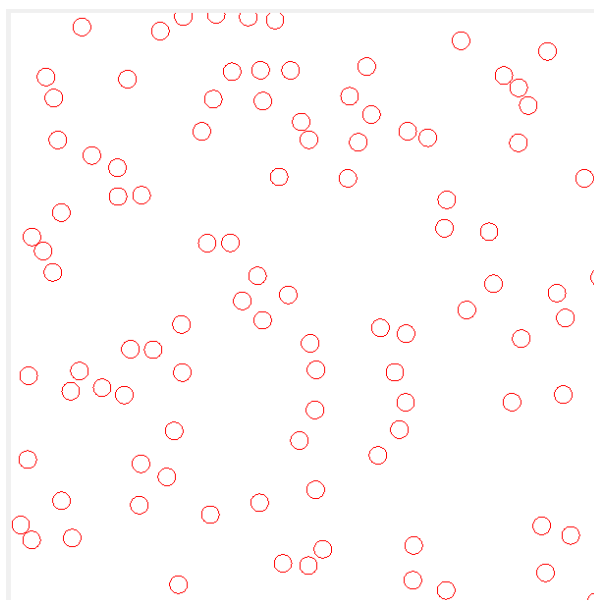


Рис.4. Система на 5000 шаге по времени

Было получено распределение молекул по скоростям для данной модели. Подсчитывалось относительная доля частиц, попадающих в интервалы $\Delta V = 2V_{max}/50$. Далее полученная зависимость сравнивалась с распределением Максвелла молекул идеального газа по скоростям, что показано на рис.5

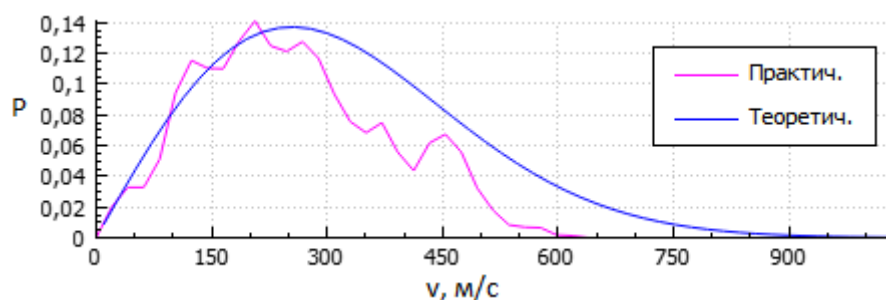


Рис.5. Распределение Максвелла.

Средняя температура системы рассчитывается по следующей формуле:

$$T = \frac{1}{Nk} \sum_i \frac{m_i V_i^2}{2}, \quad (9)$$

где k – постоянная Больцмана, N –количество частиц, i –номер частица, m и V – масса и скорость частицы соответственно.

В качестве начальной конфигурации частиц задавались различные начальные скорости. Для примера приведены разные случаи: в первом случае начальные скорости задавались 40 м/с, 160 м/с, 360 м/с. По этим скоростям вычислялись средние температуры. Распределение молекул по скоростям приведено на рис. 6.

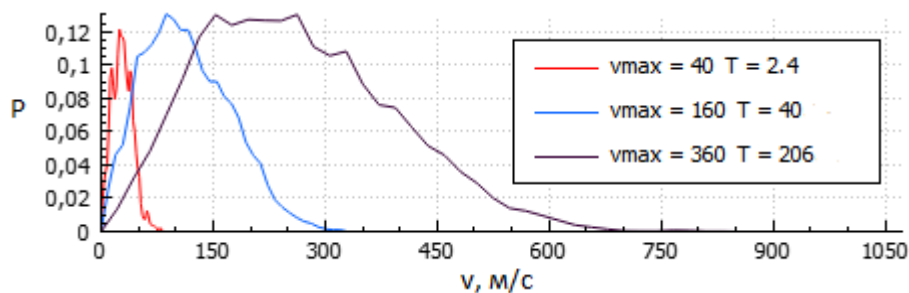


Рис.6. Распределения Максвелла при нескольких температурах.

Во втором случае начальные скорости задавались 50 м/с, 200 м/с и 450 м/с. По этим скоростям вычислялись средние температуры. Распределение молекул по скоростям для данного случая приведено на рис. 7.

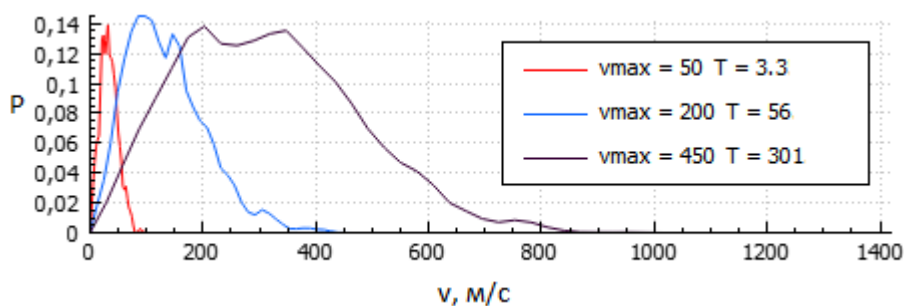


Рис.7. Распределения Максвелла при нескольких температурах.

Выводы

1. Смоделировано взаимодействие между частицами, которое описывается модифицированным потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами аргона.
2. Данная модель смоделирована корректно исходя из закона сохранения энергии, что было продемонстрировано на рис.3.
3. Установлено, что рост температуры пропорционален увеличению скорости движения частиц газа.
4. Получено распределение молекул по скоростям при нескольких начальных температурах. Из этих распределений видно, что при увеличении средней температуры увеличивается наиболее вероятная скорость.

Список литературы

1. Х.Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. Т.1. М.: Мир, 1990.
2. А. С. Васин. Компьютерный эксперимент в физике. Нижний Новгород, ННГУ, 2006.