

Модели взаимодействия частиц газа между собой

Потенциал Леннарда-Джонса — это формула для потенциальной энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между их центрами.

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

Сигма и эpsilon зависят от вещества. Второй член отвечает за притяжение молекул между собой, а первый за отталкивание (на малых расстояниях).

$$F = -\frac{dU}{dx} = \frac{24\epsilon}{r} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Это сила взаимодействия двух молекул согласно этой формуле.

Если $F > 0$ – молекулы отталкиваются.

Если $F < 0$ – молекулы притягиваются.

Именно по этим силам мы будем считать изменение импульса частицы за время dt .