Модели взаимодействия частиц газа между собой

- **Потенциал Леннард-Джонса — будем использовать**

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

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

Для программирования разделяют на несколько функций:

$$\begin{cases} U(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] & r \leqslant r_s, \\ k_1(r-r_c)^3 + k_2(r-r_c)^2 & r_s < r \leqslant r_c \\ 0 & r > r_c, \end{cases}$$

$$r_s = (26/7)^{1/6}\sigma \approx 1{,}24\sigma,\ r_c = 67/48 r_s \approx 1{,}73\sigma,\ k_1 = -\frac{387072}{61009}\varepsilon/r_s^3,\ k_2 = -\frac{24192}{3211}\varepsilon/r_s^2$$

Нужно отметить, что при $r = \sqrt[6]{2}\sigma$ потенциал взаимодействия минимален. Очень удобен для моделирования.

- **ТЕОРЕМА ВИРИАЛА И ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ МОЛЕКУЛ**

Вывод уравнения достаточно сложный. Написано, что «В целях проверки изложенного материала было рассмотрено восемь веществ и для каждого вещества независимым путем определено по четыре параметра. Получена высокая точность данного уравнения»

$$V(r) = -\frac{ka}{3\sqrt{2}N_0 r^3} + k\left[\frac{3b}{2\pi N_0 \Gamma(1-n) r^3}\right]^{1/n}$$

Это потенциал взаимодействия двух молекул, учитывает одновременное взаимодействие каждой молекулы с окружающими ее молекулами.

$$F(r) = \frac{ka}{\sqrt{2}N_0 r^4} - \frac{3k}{n}\left[\frac{3b}{2\pi N_0 \Gamma(1-n) r^{3+n}}\right]^{1/n}$$

Это сила Взаимодействия двух молекул. Учитывает одновременное взаимодействие каждой молекулы с окружающими ее молекулами.

Все константы, которые тут используются, есть в табличных данных.

Газ	a, Å^3 К^m моль$^{-1}$	b, Å^3 К^n моль$^{-1}$	m	n
He	470×10^{24}	38.8×10^{24}	1.0	0.19
Ne	3580×10^{24}	97×10^{24}	1.0	0.25
Ar	33200×10^{24}	1745×10^{24}	1.0	0.51
H_2	3750×10^{24}	110.5×10^{24}	1.0	0.25
N_2	35600×10^{24}	2350×10^{24}	1.0	0.53
O_2	35000×10^{24}	1960×10^{24}	1.0	0.52
CO	40500×10^{24}	3100×10^{24}	1.0	0.56
CH_4	55200×10^{24}	2450×10^{24}	1.0	0.50

http://www.mathnet.ru/links/7dc0180b15d49d8b0e9638c8fd13d9f4/tvt391.pdf — ссылка на эту статью

Таблица 2. Параметры потенциала взаимодействия двух молекул

Газ	M	N	α, Дж Å^M	β, Дж Å^N	$\Gamma(1-n)$	D	ε/k, К
He	3.0	15.8	2.539×10^{-21}	4.424×10^{-16}	1.153	1.823	5.951
Ne	3.0	12.0	1.934×10^{-20}	2.141×10^{-16}	1.225	2.117	29.70
Ar	3.0	5.88	1.794×10^{-19}	6.230×10^{-18}	1.808	4.113	78.70
H_2	3.0	12.0	2.027×10^{-20}	3.606×10^{-16}	1.225	2.117	26.56
N_2	3.0	5.66	1.924×10^{-19}	6.182×10^{-18}	1.884	4.353	63.94
O_2	3.0	5.77	1.891×10^{-19}	5.831×10^{-18}	1.845	4.231	78.91
CO	3.0	5.36	2.188×10^{-19}	4.487×10^{-18}	2.013	4.754	71.36
CH_4	3.0	6.00	2.983×10^{-19}	1.658×10^{-17}	1.773	4.000	97.16

- **Потенциал Букиннгема** — сильно сложно и лучше не нужно (для неполярных сферо-симметрических молекул)

$$U(r) = A\exp\left(-\alpha\frac{r}{r_m}\right) - \frac{\lambda}{r^6} - \frac{\lambda'}{r^8}$$

Где соответствующие константы вычисляются:

$$A = \left[-\varepsilon + (1+\beta)\frac{\lambda}{r_m^6}\right]e^{\alpha},\quad \lambda = \frac{\varepsilon\alpha r_m^6}{\alpha(1+\beta) - 8\beta - 6},\quad \lambda' = \beta r_m^6 \lambda,$$

- **Потенциал Штокмайера -** учитывает постоянные дипольные моменты молекул (добавляет член, отвечающий за это в уравнение для потенциала Леннарда-Джонса)

$$U(r,\theta_a,\theta_b,\varphi) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] - \frac{\mu_a\mu_b}{r^3}\,g(\theta_a,\theta_b,\varphi).$$