

МОДЕЛЬ АНСАМБЛЯ РОТАТОРІВ

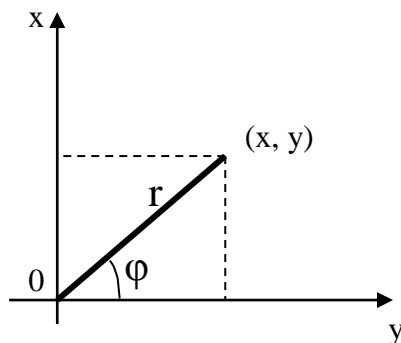
Під ротатором будемо розуміти точкову масу у вигляді симетричної гантелі масою m та довжиною l , що може обертатися навколо нерухомого центра. Якщо ротатор має одну обертальну ступінь вільності, то будемо говорити про одновимірну модель; якщо дві обертальні ступені вільності, то матимемо двовимірну модель.

Ансамблем ротаторів будемо вважати упорядковану періодичну структуру ротаторів. При розгляді одновимірної періодичної структури у вигляді ланцюжка (два найближчі сусіди) та двовимірної періодичної структури у вигляді квадратної ґратки (чотири найближчі сусіди) матимемо одновимірну модель ротаторів. При розгляді періодичної тривимірної структури у вигляді кубічної ґратки (шість найближчих сусідів) матимемо двовимірну модель ротаторів.

Система ротаторів буде характеризуватися потенціалом міжчастинної взаємодії U та температурою T . Таким чином, така систем може перебувати у різних мікростанах, але в однаковому макростані.

Одновимірний випадок.

Для опису використаємо полярну систему координат.



Кожен ротатор характеризується одним ступенем вільності – кутом орієнтації (кутом між його напрямом та додатною піввіссю). Будемо позначати цей кут як характеристику стану окремого ротатора i з одним індексом φ_i (рис. 1, а).

Кожна пара ротаторів характеризується кутом їх розорієнтації $\varphi_{i,j} = \varphi_j - \varphi_i$. Будемо позначати цей кут як характеристику взаємодії між двома ротаторами i та j з двома індексами $\varphi_{i,j}$ (рис. 1, б).

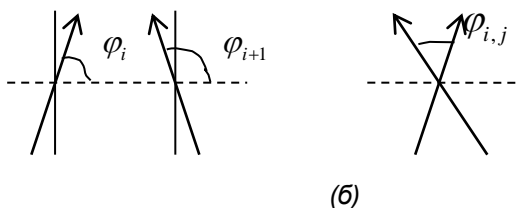


Рис.2.1. Ступінь вільності ротатора у одновимірній моделі як його основна характеристика (а) та кут розорієнтації пари ротаторів як параметр парної взаємодії (б).

Для визначення енергії парної взаємодії двох ротаторів у найближчій координаційній сфері введемо такий закон:

$$U(i, j) = U_m \sin^2(k_\varphi \varphi_{i,j}),$$

де U_m – амплітуда потенціалу взаємодії, k_φ – множник, який визначає найвигіднішу орієнтацію ротаторів.

Тоді потенціальна енергія системи ротаторів визначатиметься як

$$U_p = \sum_i \sum_{j \neq i} U_m \sin^2(k_\varphi \varphi_{i,j}). \quad (*)$$

Множник k_φ визначає характер упорядкованості системи:

- якщо $k_\varphi = 0.5$, то кожен ротатор є орієнтованою стрілкою з періодом 2π (найвигіднішою конфігурацією буде паралельна орієнтація всіх стрілок в один бік);
- якщо $k_\varphi = 1$, то кожен ротатор є неорієнтованою стрілкою з періодом π (найвигіднішою конфігурацією буде паралельне положення всіх стрілок);
- якщо $k_\varphi = 2$, то кожен ротатор є неорієнтованою стрілкою з періодом $\pi/2$ (найвигіднішими будуть прямі кути розорієнтації в околі першої координатної сфери).

Кінетична енергія системи матиме вигляд:

$$E_k = \sum_i \frac{I\omega_i^2}{2}.$$

З рівності (*) можна визначити силу парної взаємодії між двома ротаторами

$$F_{i,j} = -\frac{\partial U_p}{\partial \varphi_{i,j}}.$$

Сила, що діє з боку системи на i ротатор визначається як суперпозиція впливу всіх інших частинок системи:

$$F_i = -\sum_{j \neq i} \frac{\partial U_p}{\partial \varphi_{i,j}}. \quad (**)$$

У наближенні першої координатної сфери формула (**) матиме два або чотири доданки.

З другого рівняння Ньютона, як для молекулярної динаміки з поступальними ступенями вільності, можна визначити кутове прискорення даного ротатора як відношення сили, що діє на нього з боку системи до моменту інерції:

$$\varepsilon_i = \frac{F_i}{I},$$

де $I = 2 \frac{m}{2} \left(\frac{l}{2} \right)^2 = \frac{ml^2}{4}$ – момент інерції ротатора, ε_i – його кутове прискорення.

Далі за класичною молекулярною динамікою на кожному кроці по часу dt потрібно визначати кутову швидкість ω_i та перевизначати кут орієнтації φ_i кожного ротатора.

Отже кінцево-різницеві формули Ейлера у фазовому просторі матимуть вигляд:

$$\omega_i(t + dt) = \omega_i(t) + \varepsilon_i(t) \cdot dt;$$

$$\varphi_i(t + dt) = \varphi_i(t) + \omega_i(t + dt) \cdot dt$$

Причому прискорення буде визначатися для одновимірного ланцюжка як

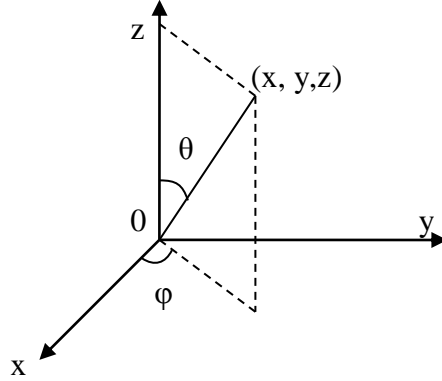
$$\varepsilon_i = -\frac{U_m (\sin k_\varphi 2\varphi_{i,i-1} + \sin k_\varphi 2\varphi_{i,i+1})}{I};$$

а для квадратної ґратки:

$$\varepsilon_{ix,iy} = -\frac{U_m (\sin k_\varphi 2\varphi_{ix,iy,ix,iy-1} + \sin k_\varphi 2\varphi_{ix,iy,ix,iy+1} + \sin k_\varphi 2\varphi_{ix,iy,ix-1,iy} + \sin k_\varphi 2\varphi_{ix,iy,ix+1,iy})}{I}$$

Двовимірний випадок

Для опису використаємо сферичну систему координат. Таким чином, енергія взаємодії будь-яких двох ротаторів залежатиме не лише від кута φ , а й від кута θ .



Оскільки візуалізація експерименту ведеться в декартовій системі координат, перехід від сферичної до декартової системи координат здійснюється за допомогою формул переходу:

$$x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi;$$

$$y = r \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi;$$

$$z = r \cdot \cos \theta.$$

Тепер система матиме 2 кута розорієнтації – φ і θ . По кожній кутовій координаті незалежно від іншої будемо обчислювати кут розорієнтації, кутову швидкість, кутове прискорення та потенціали взаємодії для кожної пари i -го та j -го ротаторів:

$$\varphi_{i,i+1} = \varphi_{i+1} - \varphi_i; \quad \theta_{i,i+1} = \theta_{i+1} - \theta_i.$$

Якщо розглядати взаємодію пари ротаторів у кубичній ґратці, які знаходяться у вузлах ix, iy, iz та jx, jy, jz .

Введемо функцію взаємодії між парою ротаторів окремо за кожним з кутів φ , θ :

$$U_{i,j} = U_m \left(\sin^2 k_\theta \cdot \Delta \theta_{ij} + \sin^2 k_\varphi \cdot \Delta \varphi_{ij} \right).$$

Тоді потенціальна енергія буде визначатися як

$$U_p = \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N U_m \left(\sin^2 k_\theta \cdot \Delta \theta_{ij} + \sin^2 k_\varphi \cdot \Delta \varphi_{ij} \right), \quad (***)$$

а кінетична:

$$E_k = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \frac{m \cdot l^2}{4} \left(\dot{\theta}_i^2 + \sin^2 \theta_i \cdot \dot{\varphi}_i^2 \right). \quad (****)$$

На жаль при переході до двовимірного випадку формули для визначення кутового прискорення по проекціях перестають бути тривіальними, простими у виведенні й зручними у використанні.

Для виведення \mathcal{E}_φ та \mathcal{E}_θ використаємо функцію Лагранжа:

$$L = E_k - U_p. \quad (*****)$$

Підставивши (***) та (****) у (*****), маємо

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m \cdot l^2}{8} \left(\dot{\theta}_i^2 + \sin^2 \theta_i \cdot \dot{\varphi}_i^2 \right) - \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N U_m \left(\sin^2 k_\theta \cdot \Delta \theta_{ij} + \sin^2 k_\varphi \cdot \Delta \varphi_{ij} \right).$$

Враховуючи, що $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$, де $q_i = \varphi, \theta$, $\dot{q}_i = \dot{\varphi}, \dot{\theta}$ і

та знайшовши потрібні похідні

$$\frac{\partial L}{\partial \varphi} = -U_m \cdot k_\varphi \cdot \sum_j \sin 2k_\varphi \Delta \varphi, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{m \cdot l^2}{4} \sin^2 \theta_i \cdot \dot{\varphi}_i,$$

розв'яжемо рівняння

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{ml^2}{4} \left(\sin 2\theta \cdot \dot{\theta} \cdot \dot{\varphi} + \sin^2 \theta \cdot \ddot{\varphi} \right),$$

$$-U_m \cdot k_\varphi \sum \sin 2k_\varphi \Delta \varphi = \frac{ml^2}{4} \sin 2\theta \cdot \dot{\theta} \cdot \dot{\varphi} + \frac{ml^2}{4} \sin^2 \theta \cdot \ddot{\varphi},$$

та визначимо кутове прискорення по куту φ

$$\ddot{\varphi} = -\frac{4U_m}{ml^2 \sin^2 \theta} k_\varphi \sum \sin 2k_\varphi \Delta \varphi - \frac{\sin 2\theta \cdot \dot{\theta} \cdot \dot{\varphi}}{\sin^2 \theta}.$$

Проведемо аналогічні виведення та знайдемо кутове прискорення по куту θ :

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{m \cdot l^2}{8} \sin 2\theta \cdot \dot{\varphi}^2 - U_m k_\theta \sum \sin 2k_\theta \Delta \theta, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = \frac{m \cdot l^2}{4} \dot{\theta}, \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = \frac{ml^2}{4} \ddot{\theta},$$

$$\frac{m \cdot l^2}{8} \sin 2\theta \cdot \dot{\varphi}^2 - U_m k_\theta \sum \sin 2k_\theta \Delta \theta = \frac{ml^2}{4} \ddot{\theta}.$$

Отже,

$$\ddot{\theta} = \frac{1}{2} \sin 2\theta \cdot \dot{\varphi}^2 - \frac{4U_m}{ml^2} k_\theta \sum \sin 2k_\theta \Delta \theta.$$

Далі можна застосувати стандартну схему Ейлера по кожній ступені вільності для кутової швидкості та кута аналогічно до формул для одновимірного випадку:

$$\omega_i^\varphi(t + dt) = \omega_i^\varphi(t) + \varepsilon_i^\varphi(t + dt) \cdot dt, \quad \omega_i^\theta(t + dt) = \omega_i^\theta(t) + \varepsilon_i^\theta(t + dt) \cdot dt,$$

$$\varphi_i^\varphi(t + dt) = \varphi_i(t) + \omega_i^\varphi(t + dt) \cdot dt, \quad \varphi_i^\theta(t + dt) = \varphi_i^\theta(t) + \omega_i^\theta(t + dt) \cdot dt$$

Забезпечення консервативності енергії системи.

Як відомо, при моделюванні методом молекулярної динаміки спостерігається розігрів системи. У роботі використано два способи для керування кінетичною енергією при моделюванні мікросканонічного ансамблю:

- 1) забезпечення постійності кінетичної енергії відповідно до заданої температури з використанням процедури перенормування;
- 2) введення в'язкої сили $F = -m\gamma v$ по аналогії з рівнянням Ланжевена, яке веде до введення додаткових доданків при визначенні кутового прискорення: $\varepsilon_\varphi' = -\gamma \omega_\varphi$, $\varepsilon_\theta' = -\gamma \omega_\theta$. При цьому кінетична енергія системи прямуватиме до нуля, а потенціальна до мінімального значення, якщо в'язкість не дуже велика.