

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова»

Физический факультет

КУРСОВАЯ РАБОТА

**Математическое моделирование поведения частиц в потенциале
Леннарда-Джонса на разных топологических фигурах**

студент 209 группы

Свиридов Никита Николаевич

Научный руководитель:
Грачев Е.А.

Москва 2021

Введение.

В данной работе исследуется взаимодействие частиц по потенциалу Леннарда-Джонса. Потенциал Леннарда-Джонса – это модель, описывающая зависимость энергии взаимодействия двух молекул от расстояния между ними. Эта модель достаточно точно передает свойства реального взаимодействия двух сферических молекул, поэтому широко используется в расчетах и моделировании.

Аннотация.

В ходе работы было проведено исследование поведения частиц при помещении их в различные пространства, такие как: ящик, цилиндр, тор, лента Мёбиуса, бутылка Клейна, проективное пространство. Имитация таких пространств осуществлялась с помощью задачи различных граничных условий и «развертывания» всех этих фигур на плоскость. Была проведена работа по установлению зависимости взаимодействия между частицами от их взаимного расположения с целью этого «развертывания» фигур на плоскость.

Помимо этого, в работе еще рассматривается взаимодействие частиц при особых граничных условиях, когда по краям стенок находятся бильяарды, с которыми частицы испытывают абсолютно упругое соударение.

Вся реализация осуществлялась с помощью ПО «Matlab 2021».

В работе имеется приложение в виде интерактивного контента, а именно, демонстрация моделирования эксперимента в формате .mp4.

Работа состоит из 10 страниц, содержит 7 литературных источников, 6 иллюстраций и 1 приложения.

Ключевые слова: взаимодействие, пространство, потенциал.

Метод. Взаимодействие.

Потенциал Леннарда-Джонса записывается в следующем виде:

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

Дифференцируя это потенциал по переменной r мы получаем зависимость $F(r)$

$$\text{Сила взаимодействия: } F(r) = \frac{d}{dr}U(r) = 4\epsilon\left[12\frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - 6\frac{\sigma^6}{r^{13}}\right],$$

где ε – глубина потенциальной ямы, r – расстояние между центрами частиц, σ – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю. Параметры ε и σ являются характеристиками атомов соответствующего вещества.

Для конкретных химических элементов параметр σ будет иметь значение порядка 1 ангстрема, что сопоставимо с размерами самого атома. В нашем же случае параметр σ подбирается сопоставимым с заданным размером частицы (что \sim в 10^8 раз больше табличных значений) для наблюдения наиболее реалистичного сценария.

Параметр ε в свою очередь, зависит от определяемой нами массы частицы. К примеру, для атома неона (Ne) отношение $\varepsilon/m \sim 1,48 \cdot 10^4$. Для комфортного наблюдения эксперимента мы уменьшаем значение ε до порядка самой массы, чтобы можно было наблюдать как притяжение, так и отталкивание частиц. Так же система предполагает наличие вязкой среды. Это сделано для того, чтобы за время эксперимента частицы приняли конечное равновесное положение.

$$F_T = -\alpha \eta v(t)$$

$$\alpha = 6\pi r$$

Метод. Абсолютно упругое соударение.

Для решения задачи об упругом соударении я использовал матрицы перехода в другую систему координат. Новая система координат определяется как система координат, в которой ось OY параллельна касательной в точке соударения, а линия, соединяющая центры окружностей параллельна оси OX.

Матрицы перехода:

$$A = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix} \quad A' = \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}$$

α определяется из взаимного расположения частицы и бильярда.

Мы переходим в такую систему координат, где применимо наиболее простое преобразование векторов скоростей:

1. Составляющая скорости вдоль оси OX' меняет свой знак (лобовое столкновение).
2. Составляющая скорости вдоль оси OY' остается неизменной

После преобразования скоростей и необходимого преобразования координат переходим обратно в старую систему координат, путем переворот новой системы координат на угол $-\alpha$

$$\begin{aligned} X &= A \cdot X' & X' &= A' \cdot X \\ V &= A \cdot V' & V' &= A' \cdot V, \end{aligned}$$

где X и X' - старые и новые координаты, V и V' - старые и новые скорости.

Метод. Топологические фигуры. Граничные условия.

В зависимости от пространства, в которое мы поместим наши частицы, они будут взаимодействовать по-разному. Есть два фактора которые следует учитывать: а) граничные условия и б) взаимодействие частиц.

- **Ящик.**

Все стенки непроницаемые;

Частицы взаимодействуют по прямым внутри ящика.

- **Цилиндр. Лента Мебиуса.**

Верх и низ непроницаемые, а право и лево проницаемы;

Частицы взаимодействуют по кратчайшему расстоянию, которое учитывается только вдоль оси OX .

- **Тор. Бутылка Клейна. Проективная плоскость.**

Все стенки проницаемые;

Частицы взаимодействуют по кратчайшему расстоянию, которое учитывается как по оси OX , так и по оси OY .

Также следует учитывать динамику движения частиц в зависимости от пространства. В ящике, цилиндре и торе взаимодействие направлено по линии соединяющей частицы. Совсем иначе обстоит дело с лентой Мёбиуса, бутылкой Клейна и проективной плоскостью. Для того чтобы развернуть эти поверхности в квадрат, мы вынуждены принимать тот факт, что для этого квадрата нет единой системы координат, в которой двигались бы все частицы. Разумеется, визуально для каждой наблюдаемой частицы мы считаем систему координат направленной одинаково, однако при расчете взаимодействия данной частицы с другими следует переходить в системы координат этих частиц, которые будут как-то повернуты относительно данной. Поворот осуществляется равномерно от 0 до 2π вдоль всей длины замкнутой поверхности.

- **Лента Мёбиуса. Бутылка Клейна.**

Ось OX остается неизменной, а угол поворота оси OY зависит от расстояния между частицами вдоль оси OX .

- **Проективная плоскость.**

Угол поворота оси OX зависит от расстояния между частицами вдоль оси OY , а угол поворота OY зависит от расстояния по оси OX .

Из-за разных условий, которые мы накладываем на границы и на взаимодействия частиц, то динамика движения в разных пространствах будет отличаться:

1. **Ящик, цилиндр, тор.**

Сила взаимодействия направлена по прямой, соединяющей центры частиц (рис 1).

2. **Лист Мёбиуса, бутылка Клейна.**

Продольная составляющая силы (ось OX): частицы притягиваются / отталкиваются вдоль линии кратчайшего пути (по оси OX).

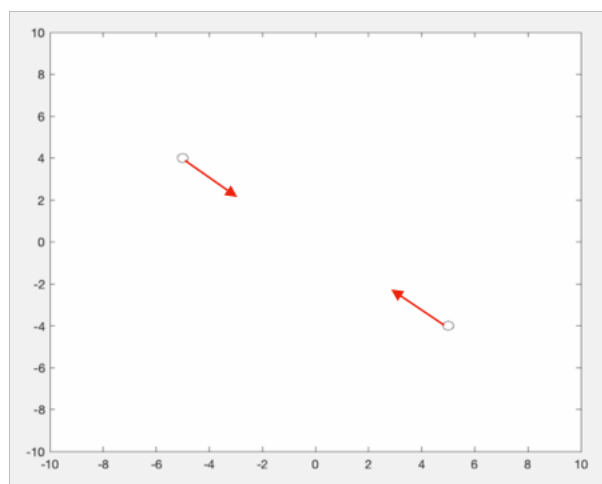


Рис 1.

Отображение взаимодействия (лист Мёбиуса / бутылка Клейна)

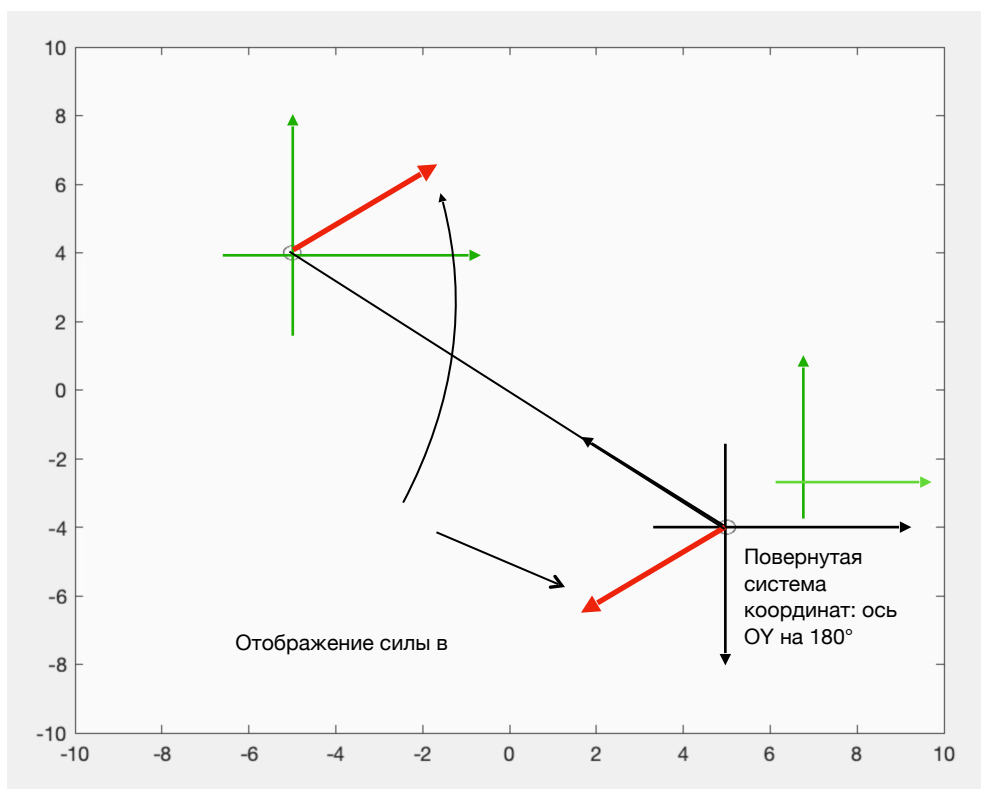


Рис 2.

Поперечная составляющая получается проекцией силы взаимодействия из системы координат частицы, образующей взаимодействия на систему координат второй частицы.

Таким образом, частицы, находящиеся на расстоянии вдоль оси ОХ больше чем на четверть длины вдоль поперечного направления относительно линии склейки с переворотом, будут отталкиваться вдоль оси ОУ (продольного направления относительно линии склейки с переворотом) (рис 2).

3. Проективная плоскость.

Продольная составляющая силы и поперечная составляющая получаются проекцией силы взаимодействия из системы координат наблюдаемой частицы на систему координат второй частицы (рис 3).

Две любые частицы, будучи в одной единой системе координат и испытывая в ней притяжение, в нашем же представлении будут испытывать отталкивание (если они находятся на достаточном расстоянии по оси ОХ и ОУ - большем чем четверть соответствующего линейного размера) из-за поворота системы координат больше чем на 90° .

Отображение взаимодействия (проективная плоскость)

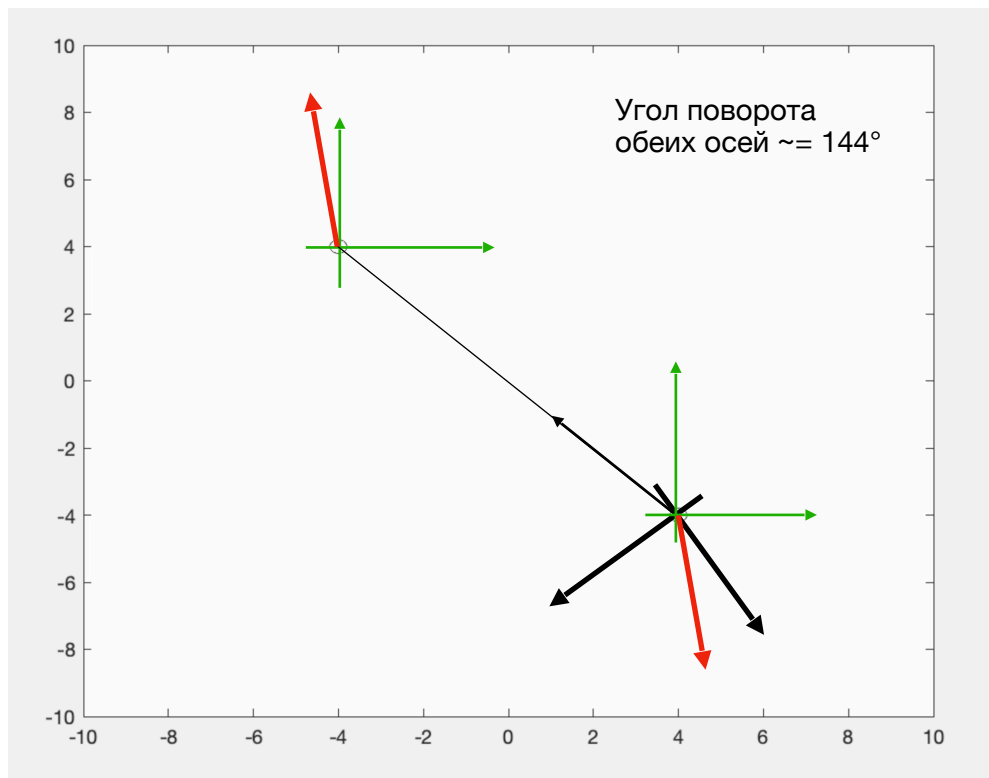


Рис 3.

Метод. Реализация. Программа

- В начале программы задаются некоторые ключевые параметры, которые определяют объем данных для обработки:

`n = 100;` — Количество частиц

`dura = 20;` — Время проведения эксперимента

`dt = 0.0001;` — Шаг по времени

`T = dura/dt;` — Количество итераций

- Для хранения всей информации создаются массивы для координаты, ускорения и скорости:

`x = zeros (2*n,T);` — хранит значения координаты X и Y

`v = zeros (2*n,1);` — хранит значения скорости Vx и Vy

`a = zeros (2*n,1);` — хранит значения ускорения ax и ay

- Итерация:

`for t = 2:T`

`. . .`

Пересчет ускорений

`for i = 1:n`

`a(2*i-1) = (forceXpeer(i) + frictionX(i))/mass(i);`

`a(2*i) = (forceYpeer(i) + frictionY(i))/mass(i);`

`end`

Пересчет скоростей

`for i = 1:n`

`v(2*i-1) = a(2*i-1)*dt + v(2*i-1);`

`v(2*i) = a(2*i)*dt + v(2*i);`

`end`

Запись координат

`for i = 1:n`

`x(2*i-1,t) = (.5*a(2*i-1)*dt^2 + v(2*i-1)*dt) + x(2*i-1,t-1);`

`x(2*i,t) = (.5*a(2*i)*dt^2 + v(2*i)*dt) + x(2*i,t-1);`

`end`

`end`

- Ускорения определяются двумя силами: сила притяжения-отталкивания и сила вязкого трения:

Сила вязкого трения - зависит только от скорости.

```
frictionX(i) = -alpha*nu*v(2*i-1);
```

Сила отталкивания / притяжения - определяется как сумма всех сил со стороны других частиц действующих на данную.

```
for i = 1:n-1
    for j =i+1:n
        xj = x(2*j-1) - x(2*i-1);
        yj = x(2*j) - x(2*i);
        dist = sqrt(xj^2+yj^2);
        forceXi = forceX(i) + (xj/dist)*4*eps*(-12*b^12 + 6*b^6*(dist)^6)/
        ((dist)^13);
        . . .
    end
end
```

- Когда все координаты частиц за все время T известны, то следом записывается видеозапись.

Результаты работы

Для всех типов фигур характерно следующее:

- Когда частиц мало по сравнению с размерами ограниченной поверхности то они скапливаются в кластеры (рис 4).

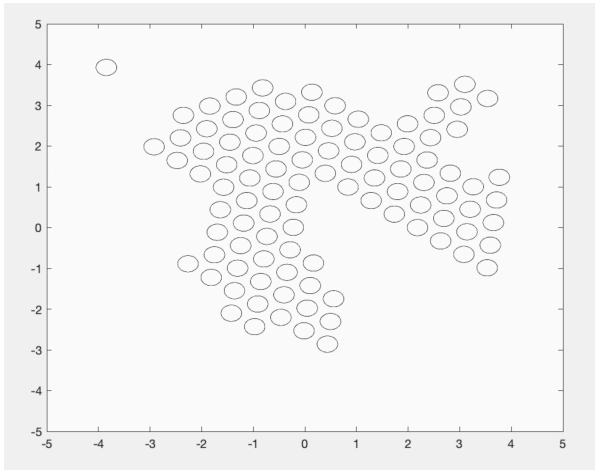


Рис 5. - один кластер

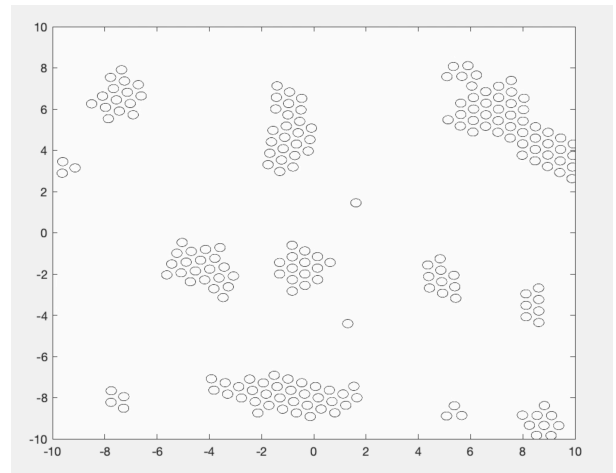


Рис 4. - кластеры

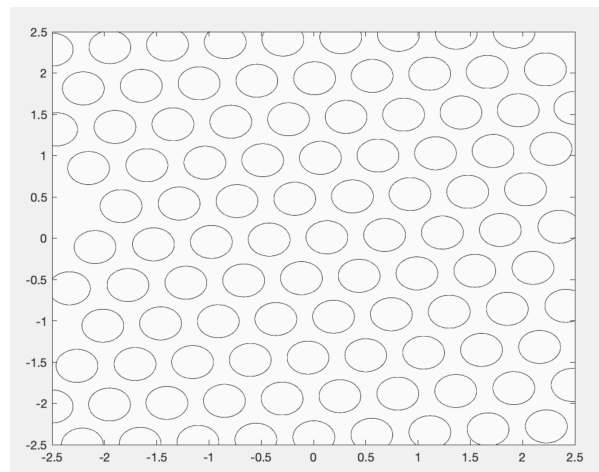


Рис 6. - решетка

- Если их достаточно много, то могут собраться в 1 большой кластер (рис 5).
- Когда частиц достаточно много ($\pi\sigma^2 \approx a \cdot b$, а и b - линейные размеры поверхности) то они собираются в кристаллическую решетку (рис 6).
- Также можно отличить динамику движения двух частиц на листе Мёбиуса и в бутылке Клейна. Частицы ведут себя очень интересный способом - своего рода затухающие колебания: при расстоянии между частицами по оси ОХ $x > L/4$ (четверть длины ленты/бутылки), частицы отталкиваются относительно оси ОУ, а при $x < L/4$ частицы притягиваются относительно оси ОУ.
- Не менее интересным образом обстоит дело с проективной плоскостью: для проективной плоскости существует устойчивое состояние, которое поддерживается силами притяжения! Если 2 частицы расположены на достаточном расстоянии и между ними действуют силы притяжения, то они

займут положение удаленное по оси OY и оси OX на половину длины соответствующих линейных размеров. В трехмерном представлении это будет означать, что частицы находятся друг под другом: одна на лицевой, другая на обратной стороне.

Список литературы:

1. https://ru.wikipedia.org/wiki/Потенциал_Леннарда-Джонса - Потенциал Леннарда-Джонса, материал из Википедии — свободной энциклопедии
2. Цянь Сюэ-Сень. Физическая механика. — М.: Мир, 1965. — 544 с. (428 с. диффузия бинарной смеси, 348 с. константы в потенциале Леннарда-Джонса для разных веществ)
3. https://ru.wikipedia.org/wiki/Бутылка_Клейна - Бутылка Клейна, материал из Википедии — свободной энциклопедии
4. https://ru.wikipedia.org/wiki/Лента_Мёбиуса - Лента Мёбиуса, материал из Википедии — свободной энциклопедии
5. https://ru.wikipedia.org/wiki/Проективное_пространство - Проективное пространство, материал из Википедии — свободной энциклопедии
6. <https://ugatu.su/media/uploads/MainSite/Science/dissovet/06/2014/MarinDF/Marin-avtoreferat.pdf> - диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Методы ускорения расчетов математических моделей молекулярной динамики»
7. <http://www.mathnet.ru/links/48ce02a4ddc7ae43b1baf5fde241dd8/tvt1381.pdf> - М. Н. Магомедов, О вычислении параметров потенциала Ми–Леннарда-Джонса, ТВТ, 2006, том 44, выпуск 4, 518–533