**Лабораторная работа «Определение теплоёмкости газа из частиц, взаимодействующих по потенциалу Леннард-Джонса»**

**Цель работы:** методом молекулярной динамики определить теплоёмкость благородного газа, потенциальная энергия взаимодействия в котором задана потенциалом Леннард-Джонса.

Известно, что потенциал Леннард-Джонса хорошо описывает благородные газы. В данной работе в качестве благородного газа взят гелий. Его параметры таковы:

Все расчёты молекулярной динамики проводились в программе LAMMPS в единицах lj следующим образом:

1. Была задана ячейка размером 10×10×10
2. В случайные места ячейки помещено 60 частиц
3. Задаётся распределение скоростей
4. Определён потенциал Леннард-Джонса с радиусом обрезания в 10
5. Произведена минимизация (для устранения случайных ошибок из-за случайного наполнения.
6. Задан NVT-ансамбль с конкретной температурой.
7. Система проходит 2500 шагов для установления температуры, далее на протяжении 20000 шагов снимается шаг и полная энергия системы. Вывод осуществляется в файл.
8. Шаги 6-7 повторяются для всех температур от 1 до 9,9 с шагом 0,1 (реализован loop с числом повторений = 90 и перезаданием температуры в зависимости от номера повторения).

Сам скрипт представлен в файле *in.melt*, полученные данные представлены в папке */raw\_data.*

Далее были посчитаны средняя энергия системы, её квадрат и средний квадрат в зависимости от температуры (скрипт для обработки - dump.py, полученные данные — dump.txt; данные по столбцам: температура — средняя энергия — квадрат средней энергии — средний квадрат энергии).

Далее была посчитана теплоёмкость двумя методами: как производную полной энергии (конечную разность в нашем случае), и как результат данного выражения:

Зависимость теплоёмкости от температуры подсчитана с помощью скрипта *C\_calc.py,* результат записан в файл *dump\_C.txt.* Данные, полученные разными методами, нанесены на графики (pdf файлы).

С учётом нормировки на количество атомов (энергия в выводе LAMMPS в единицах LJ считается в пересчёте на атом) теплоёмкость, посчитанная разными методами, совпадает (для подробностей подсчёта смотрите файл *fit.log*):

Переведём полученное значение в СИ:

Экспериментальное значение изобарной теплоёмкости гелия:

С учётом формулы Майера получим

**Вывод:** погрешность подсчёта составляет 0,08%. С учётом того, что первый метод определения теплоёмкости дал погрешность 3,2%, а второй — 0,88%, то можно заявлять о том, что модель потенциала Леннард-Джонса хорошо описывает гелий в газовой фазе.