

Моделирование газа Леннарда-Джонса

Аслан Таибов

Б02-107

13 декабря 2022 г.

Параметры модели

- Количество частиц в системе $N = 512$
- Плотность $\rho^* = 0.1$
- Температура $T^* = 2.7$
- Шаг по времени $dt^* = 0.0005$
- simulation length (t^*) = 500
- $r_{cut}^* = 4$
- Масса частицы $m = 1$
- $\varepsilon = 1$
- $\sigma = 1$

Так как величины ε , σ , m равны 1, то все приведённые в работе величины согласованы с безразмерными единицами измерения (reduced unit)

В модели реализованы следующие пункты:

1. Взаимодействие по потенциалу Леннарда-Джонса
2. Расчетная схема Верле
3. Периодические граничные условия

Код можно посмотреть тут

Результаты

1. Закон сохранения энергии:

Kinetic Energy, Potential Energy и Summary

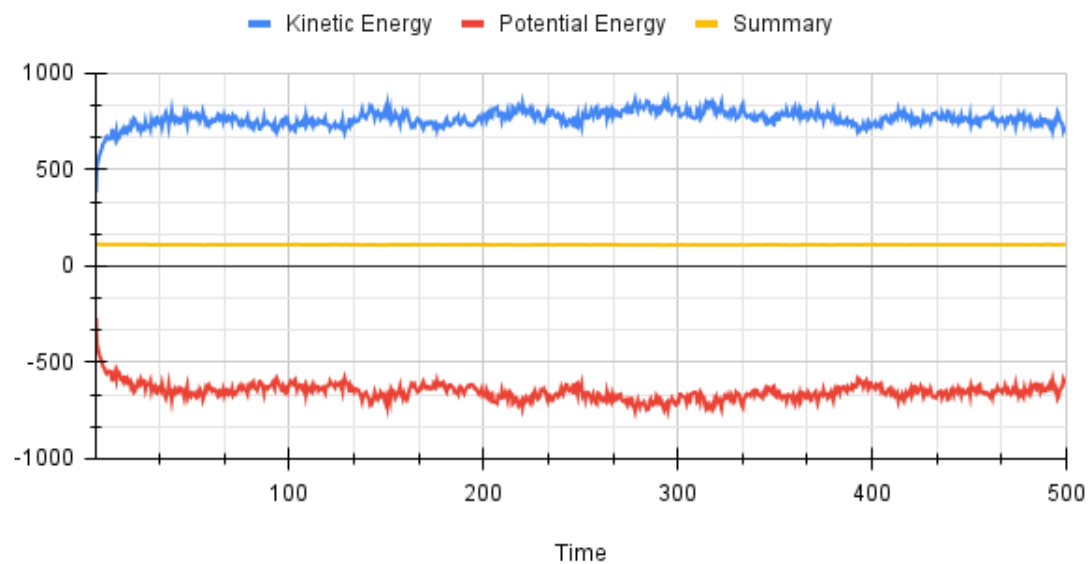


Рис. 1: График общего плана

Kinetic Energy, Potential Energy и Summary

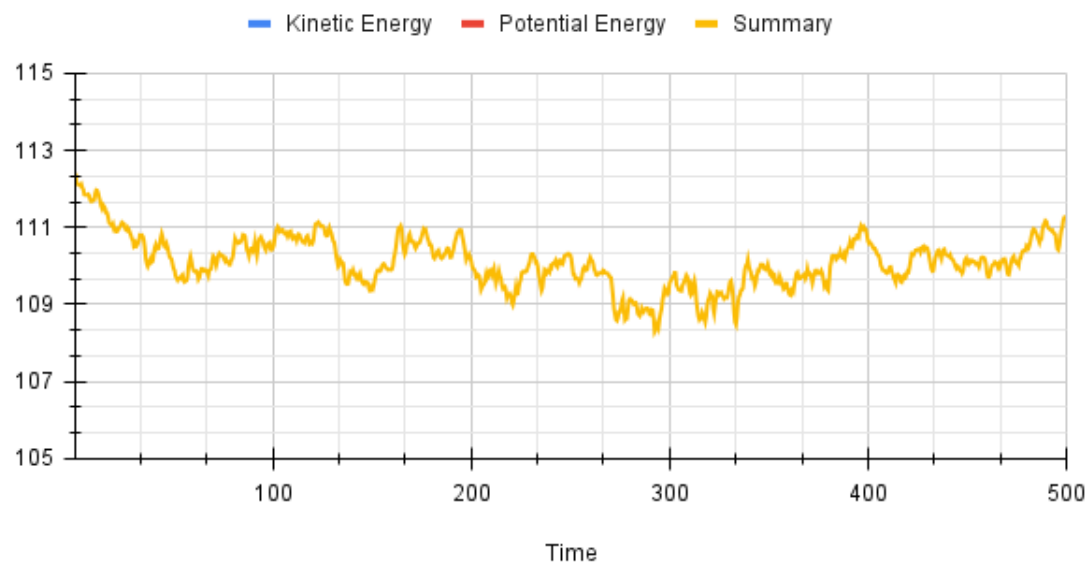


Рис. 2: Увеличенный график

2. Закон сохранения момента импульса:

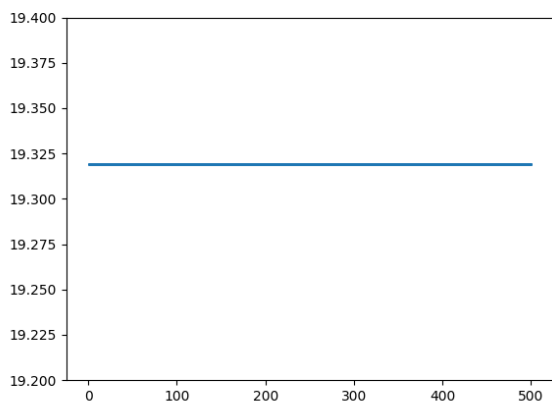


Рис. 3: Зависимость \vec{p}_Σ от времени

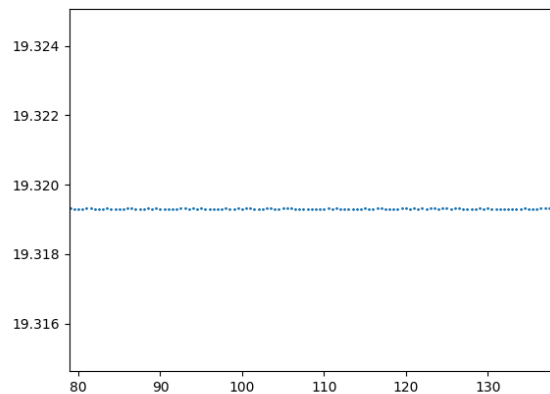


Рис. 4: Увеличенный график $\vec{p}_\Sigma(t)$

3. Распределение по скоростям

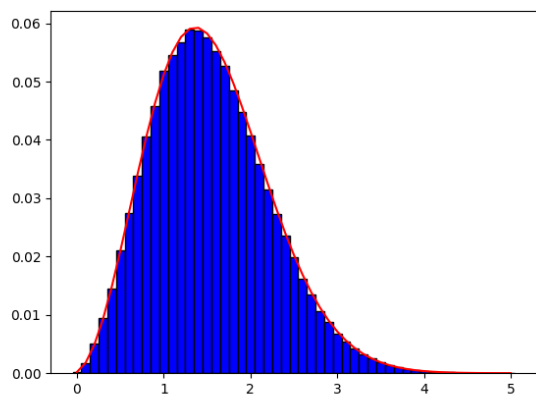


Рис. 5: Распределение по модулю скорости, усреднённое по времени (красная линия - теоретическая pdf)

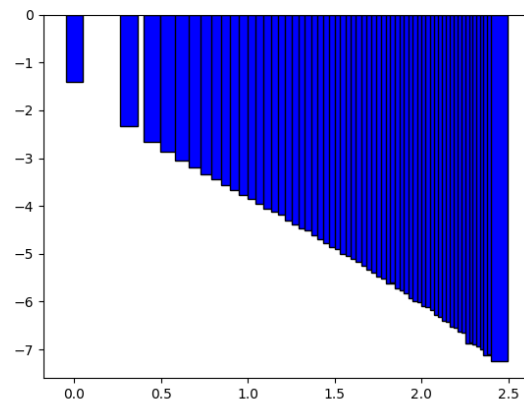


Рис. 6: Распределение по проекции V_x^2 , в полулогарифмических координатах

- Анимация движения атомов присутствует на соответствующем репозитории github в виде gif файла. Написал небольшую программу, которая преобразует выходной файл с координатами в формат, подходящий для Ovito (что-то типа lammps dump)

5. Зависимость среднеквадратического смещения от времени:

Для получения корректных результатов о смещениях частиц по времени, программа запоминала каждое прохождение каждой частицы через границы, чтобы получить изменения координат точек без резких скачков на величину длины стороны бокса.

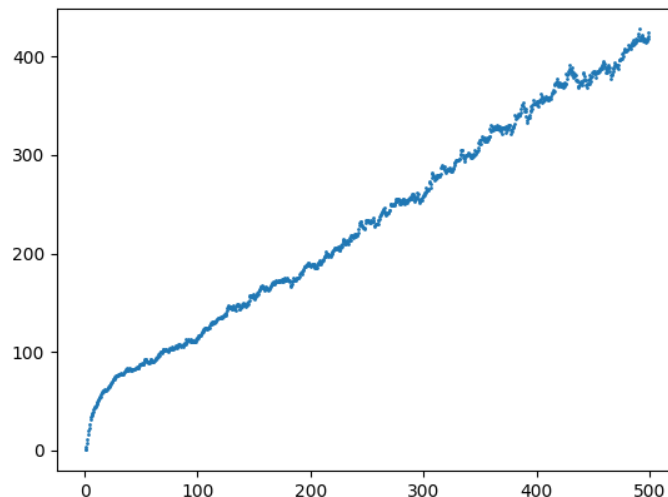


Рис. 7: Зависимость $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\vec{r}^i(t) - \vec{r}^i(0)|^2$ от t

6. Коэффициент диффузии

С помощью среднеквадратического смещения найдём зависимость коэффициента самодиффузии от времени. Значение, к которому будет стремиться график и есть значение искомого коэффициента.

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle |\vec{r}(t) - \vec{r}(0)|^2 \rangle}{6 \cdot t}$$

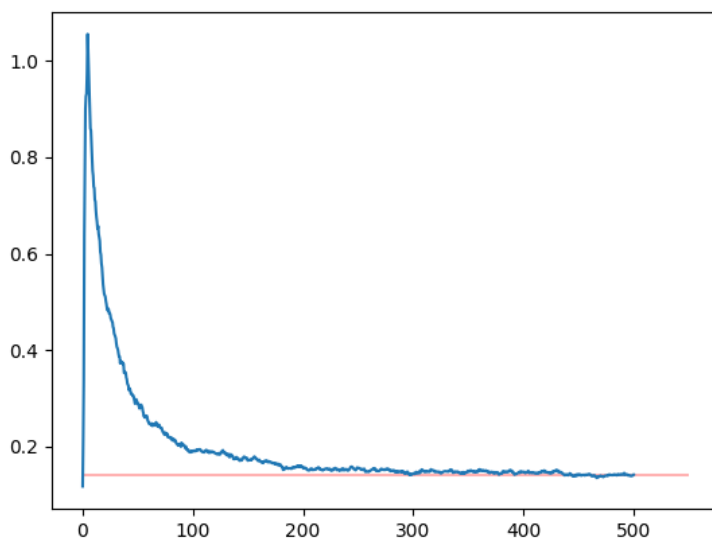


Рис. 8

Отсюда получаем, что $D^* = 0.14 \frac{\sigma^2}{\sigma \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}} = 0.14 \sigma \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}$, где $\sigma \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}$ - размерность времени в безразмерных единицах

7. Оценим эффективное сечение столкновения молекул $\sigma_{\text{эфф}}$ через минимальное расстояние, на которое сближаются молекулы, имеющие среднюю энергию поступательного движения $\bar{E}_k = \frac{3k_B T}{2}$

$$2 \cdot \frac{3k_B T}{2} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{\sigma_{\text{эфф}}}} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r_{\sigma_{\text{эфф}}}} \right)^6 \right]$$

Решая квадратное уравнение получаем:

$$r_{\min}^* = \sigma \cdot \left(\frac{\sqrt{1 + \frac{3k_B T}{\varepsilon}} - 1}{\frac{3k_B T}{2\varepsilon}} \right)^{1/6}$$

Теперь перейдём к безразмерным единицам, учитывая, что $T^* = \frac{k_B T}{\varepsilon}$

$$r_{\min}^* = \sigma \cdot \left(\frac{\sqrt{1 + 3T^*} - 1}{\frac{3}{2}T^*} \right)^{1/6}$$

Найдём температуру нашего газа:

Из графика зависимости энергий от времени видно, что установившаяся суммарная кинетическая энергия системы оценочно равна $E_{\text{kin_sum}} = 700$

$$E_{\text{kin_sum}} = N \cdot \frac{1}{2} k_B T = N \cdot \frac{1}{2} \varepsilon T^*$$

Отсюда $T^* = 2.7$

Тогда $r_{\min}^* = 0.92 \sigma$ и эффективное сечение $\sigma_{\text{эфф}}^* = \pi r_{\min}^2 = 2.5 \sigma^2$

Теперь оценим длину свободного пробега с учётом движения через эффективное сечение:

$$\lambda^* = \frac{1}{\sqrt{2} \sigma_{\text{эфф}}^* \cdot n} = 2.83 \sigma^2$$