Министерство образования и науки Российской федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего образования

«Нижегородский научно-исследовательский государственный университет

им. Н.И. Лобачевского»

Физический факультет

Кафедра информационных технологий в физических исследованиях

Исследование распределения по скоростям молекул двумерного идеального газа

Отчет по лабораторной работе

Выполнил

студент группы 0522М1ИС

Боровков Сергей

Проверил

доцент каф. ИТФИ, к.ф.-м.н.

Васин А.С.

Нижний Новгород

2022 г.

**Содержание**

# Цели работы

1. Построить численную модель идеального газа методом молекулярной динамики, используя в качестве потенциала межатомного взаимодействия модифицированный потенциал Леннарда-Джонса с параметрами аргона.
2. Исследовать распределение скоростей атомов при разных температурах.
3. Сравнить полученные распределения скоростей с теоретическим распределением Максвелла.

# Теоретическая часть

1. Метод молекулярной динамики

В методе молекулярной динамики (МД) решается система уравнений Ньютона:

, (1)

где – масса *i*-ой частицы, – радиус-вектор *i*-ой частицы, – сила, действующая на *i*-ую частицу со стороны всех остальных частиц.

Сила взаимодействия любых двух частиц зависит только от расстояния между ними. Тогда полная потенциальная энергия системы , состоящей из частиц, определяется суммой энергий двухчастичных взаимодействий [4]:

(2)

где – энергия взаимодействия двух частиц с номерами и , расстояние между этими частицами.

2. Численное решение уравнений движения

Для расчёта координат и скоростей для всех частиц на текущем шаге по времени используется алгоритм Верле. Алгоритм Верле в скоростной форме выглядит так [5]:

(3)

(4)

где – номер шага по времени, – номер частицы, для движения в плоскости, – шаг по времени, – масса частицы, –-ая проекция силы, действующая на -ю частицу со стороны всех других частиц.

Данный алгоритм является оптимальным выбором из-за его вычислительной эффективности и точности.

3. Периодические граничные условия

Один из способов минимизировать поверхностные эффекты и более точно промоделировать свойства макроскопической системы заключается в использовании периодических граничных условий. Эти условия позволяют сохранять количество движущихся атомов в расчётной ячейке: когда атом пересекает ячейку с одной стороны, он оказывается в противоположной стороне с той же скоростью.

Для этого применяется следующий алгоритм [6]:

После расчёта следует делать проверку и изменить координаты:

если , то ,

если , то ,

где – это , или , – размер расчётной ячейки по координатам – это , или .

Кроме того, при расчёте сил нужно учитывать и частицы, находящиеся от данной частицы с той стороны расчётной ячейки, куда она входит. Это можно сделать так [6]:

если , то .

4. Потенциал межатомного взаимодействия

В качестве потенциала межатомного взаимодействия используется модифицированный потенциал Леннарда-Джонса:

(5)

где – функция обрезания. (6)

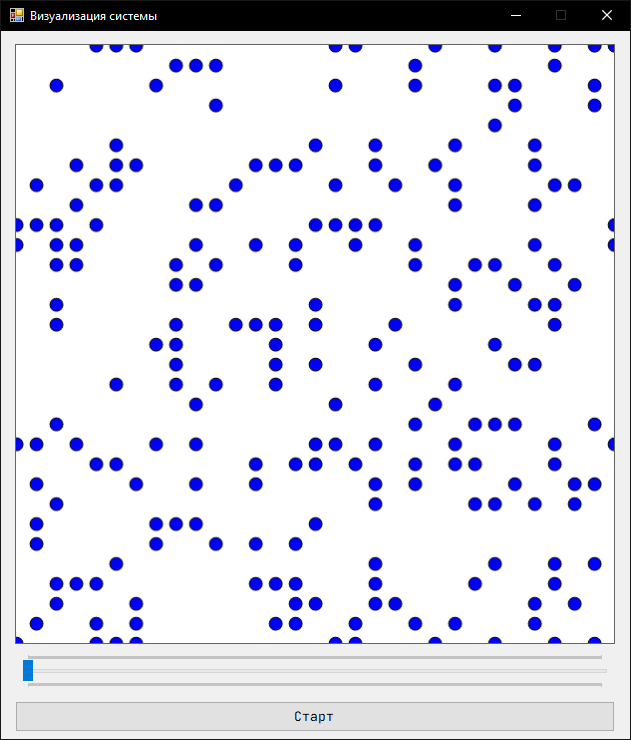
где , радиус обрезания , – равновесное расстояние между центрами атомов [8], – расстояние между центрами взаимодействующих атомов, – глубина потенциальной ямы, – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю. Для атомов аргона – модуль потенциальной энергии взаимодействия между атомами при равновесии, нм.

Эта модель потенциала описывает зависимость энергии взаимодействия двух молекул от расстояния между ними. Она достаточно точно передаёт свойства реального взаимодействия двух сферических неполярных молекул, поэтому широко используется в расчётах и моделировании.

При больших атомы притягиваются, что соответствует члену в формуле (5). Эту зависимость можно обосновать теоретически и обусловлена она силами Ван-дер-Ваальса (межмолекулярное взаимодействие). Из квантовой теории следует, что электроны в атомах колеблются, причем эти колебания вызывают силу притяжения, а гармоническое упрощение модели этих колебаний по трём осям даёт степень 6. На малых расстояниях атомы начинают сильно отталкиваться из-за перекрытия электронных облаков, в противном случае тело не смогло бы иметь конкретный объём. Процессу отталкиванию соответствует член . В этом случае степень 12 имеет полуэмпирическое обоснование. Вообще, из квантовой теории следует, что член, отвечающий за отталкивание частиц, экспоненциальный , ( и – константы), но такой вид взаимодействия не соответствует действительности, так как при расстояниях меньших чем какое-то потенциальная энергия частиц стремится к −∞. Поэтому предположили, что этот член имеет обратную пропорциональность расстоянию между центрами молекул. И предположение хорошо работает на практике. Оно показывает, что степень от 9 до 14 может дать результаты, соответствующие экспериментальным. Обычно берут степень 12, потому что она чаще всего угадывает результат и удобна тем, что [9].

5. Методика моделирования

Расчётная ячейка берётся в форме кварта со сторонами , где – параметр модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (равновесное расстояние между частицами). Число атомов подбирается таким образом, чтобы движение напоминало движение молекул идеального газа. Частицы располагаются случайным образом в узлах квадратной решётки.



*Рис. . Пример начального расположения частиц*

Расчёты проводятся методом молекулярной динамики в NVE-ансамбле, т.е. при постоянном числе частиц N, объёме V, энергии E.

Макросостояние системы характеризуют температурой и полной энергией . Температура выражается через кинетическую энергию согласно теореме о равнораспределении [10].

(6)

Полная энергия системы представляет собой сумму полной кинетической и потенциальной энергии:

(8)

Важным параметром расчётов является величина шага интегрирования . При больших шагах становится существенной ошибка численного решения уравнений, а при малых – моделирование становится неоправданно долгим. В качестве оптимального значения было выбрано , где характерное время .

Для достижения требуемой температуры системы производится так называемая перенормировка скоростей. Для этого на определённых шагах по времени вычисляется коэффициент:

, (9)

где – кинетическая энергия равновесного состояния, соответствующего заданной температуре, – кинетическая энергия структуры, – заданная температура, – постоянная Больцмана, .

После расчёта коэффициента, скорости пересчитывается по формуле:

, (10)

где , .

Основная задача моделирования – исследовать распределение по скоростям молекул двумерного идеального газа при разных температурах, а поскольку , то следует подобрать эти температуры в соотношении примерно 1:4:9. Далее, построить график распределения по скоростям и сравнить с теоретическим распределением, а также найти наиболее вероятные и средние значения скоростей.