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 вычислительной работе

Выполнил

студент группы 0522М1ИС

Боровков Сергей

Проверил

доцент каф. ИТФИ, к.ф.-м.н.

Васин А.С.

Нижний Новгород

2022 г.

# 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 [1]:

(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 [2]:

(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 [3]:

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 [3]:

если , то .

4. Потенциал межатомного взаимодействия

В качестве потенциала межатомного взаимодействия используется модифицированный потенциал Леннарда-Джонса [4]:

(5)

где – функция обрезания. (6)

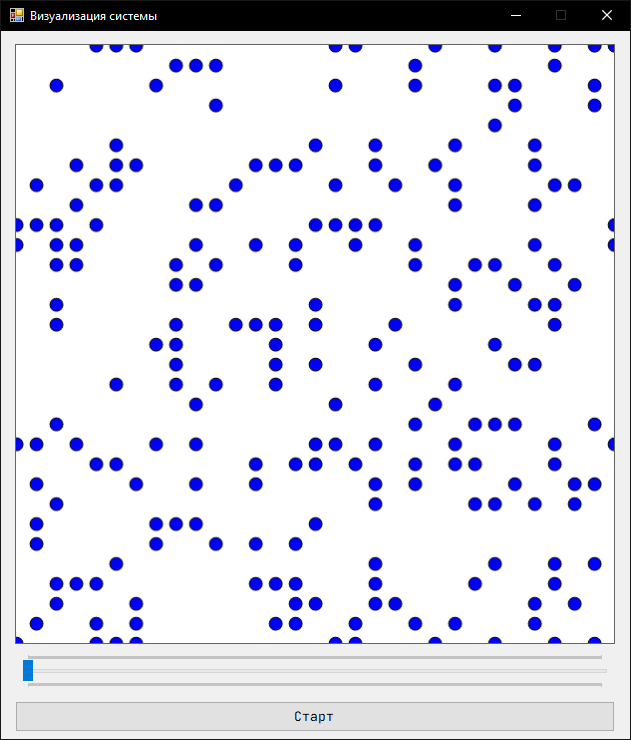
где , радиус обрезания , – равновесное расстояние между центрами атомов, – расстояние между центрами взаимодействующих атомов, – глубина потенциальной ямы, – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю. Для атомов аргона – модуль потенциальной энергии взаимодействия между атомами при равновесии, нм [4].

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 [5].

5. Методика моделирования

Расчётная ячейка берётся в форме квадрата 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 сетки со стороной клетки . Делается это таким образом для того, чтобы атомы не налегали друг на друга. Пример начального построения расчётной ячейки представлен на рис.1.



*Рис. 1. 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 [6].

(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. Далее, построить график распределения по скоростям и сравнить с теоретическим распределением, а также найти наиболее вероятные и средние значения скоростей.

6. Распределение скоростей атомов в идеальном газе

Для идеального газа распределение скоростей атомов в идеальном газе будет соответствовать распределению Максвелла. Распределение Максвелла – это такое распределение частиц по скоростям, которое в идеальном газе устанавливается самопроизвольно и не меняется с течением времени вследствие теплового или хаотического движения молекул и их столкновений, при этом давление и температура остаются постоянными, а термодинамическая система находится в равновесном тепловом состоянии. Это означает, что элементарное количество молекул в любом заданном интервале скоростей от до остается приблизительно неизменным: , а, следовательно, и элементарная вероятность попадания в этот интервал скоростей не изменяется .

В основе вывода распределения Максвелла лежат следующие положения:

1. Идеальный газ представляет собой совокупность большого числа одинаковых, абсолютно упругих шариков-молекул, столкновения между которыми совершаются по типу упругого удара.
2. После столкновения все направления разлета молекул равновероятны.
3. Проекции скоростей и их абсолютные значения рассматриваются как независимые случайные величины (по теории вероятностей выполняется теорема умножения вероятностей случайных событий).

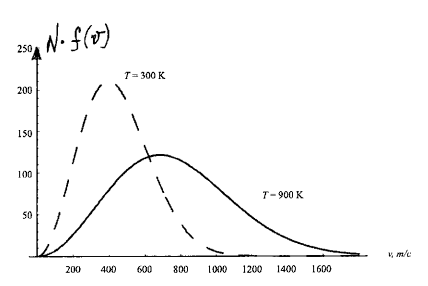
Если задать начальные скорости всех частиц равными , то для двумерного идеального газа теоретическое распределение Максвелла имеет вид:

(11)

В качестве можно взять среднеквадратическую скорость атомов для определённой температуры, которая выводится из уравнения равнораспределения для двумерного случая:

(12)

Графический вид распределения Максвелла представлен сплошной и пунктирной линиями, как пример, для зависимости от температуры на рис. 2.

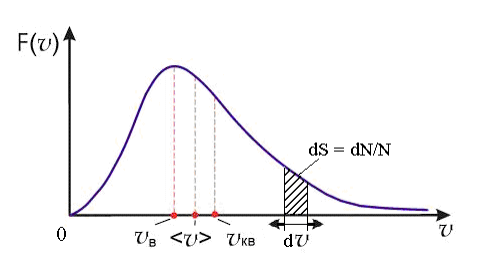


*Рис. 2. Графический вид распределения Максвелла[8]*

Поскольку множитель экспоненты (20) при возрастании скорости убывает быстрее, чем множитель , то кривая асимметрична. Она начинается от нуля, достигает максимума, а затем асимптотически стремится к нулю.

Кривая распределения начинается в начале координат, и это означает, что неподвижных молекул в газе нет. Из того, что кривая асимптотически приближается к оси абсцисс при бесконечно больших скоростях, следует, что молекул с очень большими скоростями мало. Это легко объяснимо. Для того чтобы молекула могла приобрести при столкновениях очень большую скорость, ей необходимо совершить много таких столкновений, при которых она получает энергию, и ни одного столкновения, при котором она ее теряет. Поскольку такая ситуация маловероятна, то слишком большие и слишком малые значения скорости молекул по сравнению с максимальным значением должны быть крайне редки.

Распределение Максвелла содержит три характеристические скорости, отношение между которыми не меняется при изменении равновесного теплового состояния идеального газа (рис.). Это **наивероятнейшая скорость** или скорость, с которой движется большинство молекул газа. **Средняя скорость теплового движения** и **среднеквадратичная** скорость теплового движения. Их относительное расположение приведено на рис. 3.

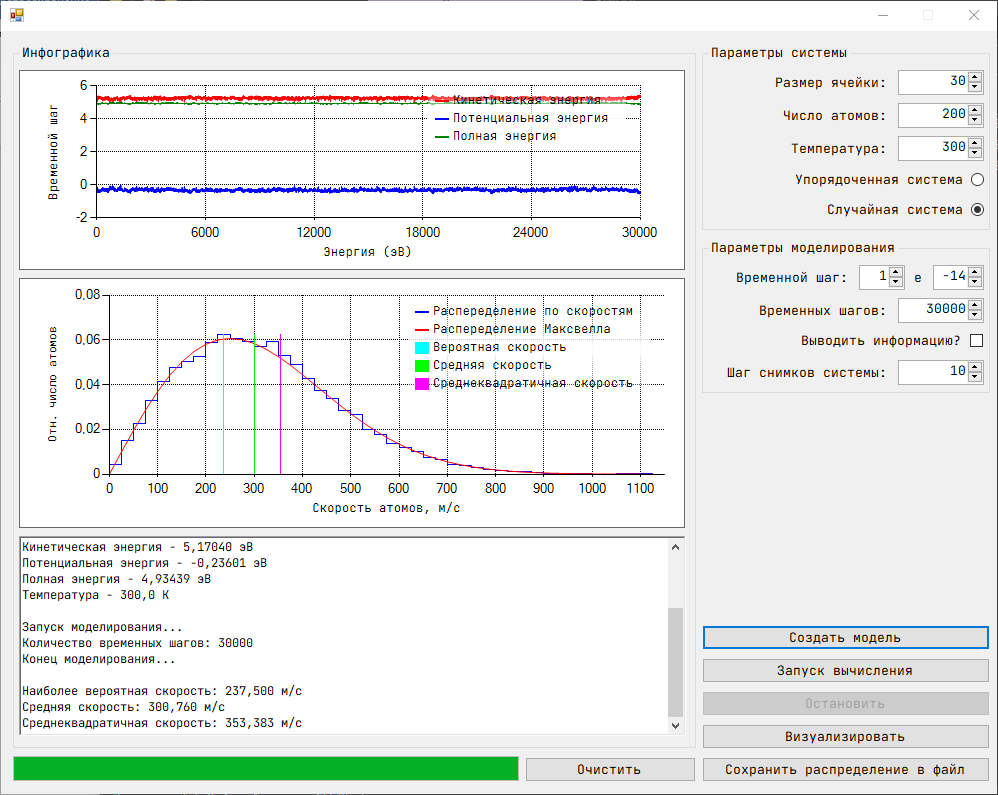


*Рис. 3. Графический смысл площади фигуры под графиком распределения и характеристические скорости распределения Максвелла [8].*

Асимметрия кривой Максвелла так же означает, что наивероятнейшая скорость не равна средней арифметической всех скоростей молекул. То, что средняя скорость становится больше наивероятнейшей скорости, объясняется тем, что в газе преобладают молекулы, движущиеся со скоростями большими, чем наивероятнейшая.

# Практическая часть

Для исследования распределения по скоростям молекул двумерного идеального газа была создана молекулярно-динамическая программа (рис. 4).



*Рис. 4. Вид программы, используемой для исследования*

Для приведения системы к заданной температуре, применяется перенормировка скоростей в течение 200 временных шагов.

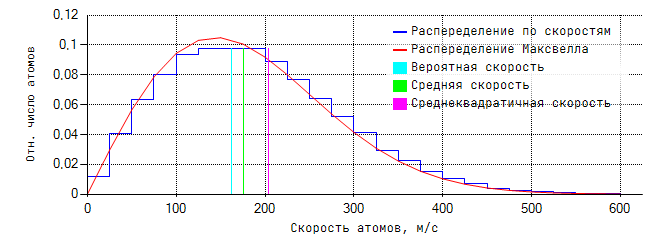
Для получения гистограммы распределения по скоростям, берётся интервал от 0 до и разбивается на равные подинтервалы . На последующих шагах моделирования подсчитывается число частиц, имеющих скорости от до , занося их в массив и нормируя все значения по количеству частиц. Далее определяется средние значения за все шаги и заносятся в массив . Таким образом получаем распределение атомов по скоростям.

Результаты исследования

Создадим расчётную ячейку размером . Число атомов выберем 200. Поскольку , температуры будем задавать в соотношении примерно 1:4:9, т.е. при 100К , 400К, 900К.

Таким образом получим (рис. 5а,б,в):

* При 100 К:



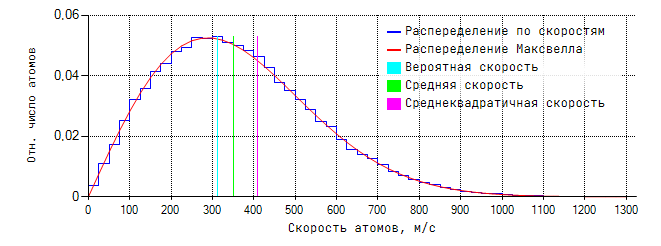
*Рис. 5a. Гистограмма распределения (синий) и теоретическое распределение Максвелла (красная) при 100 К*

**Наиболее вероятная скорость** (прак. | теор.): 162,5 | 150 м/с;

**Средняя скорость** (прак. | теор.): 176,21 | 180,74 м/с;

**Среднеквадратическая**: 204,03 м/с;

* При 400 К:



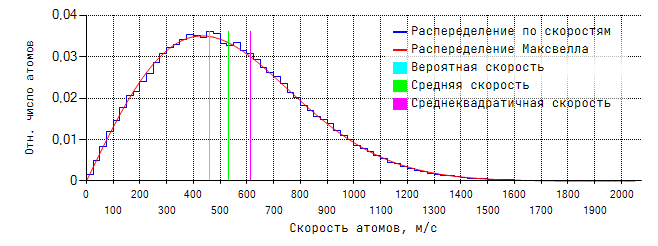
*Рис. 5б. Гистограмма распределения (синий) и теоретическое распределение Максвелла (красная) при 400 К*

**Наиболее вероятная скорость** (прак. | теор.): 312,5 | 300 м/с;

**Средняя скорость** (прак. | теор.): 350,24 | 361,58 м/с;

**Среднеквадратическая**: 408,05 м/с;

* При 900 К:



*Рис. 5в. Гистограмма распределения (синий) и теоретическое распределение Максвелла (красная) при 900 К*

**Наиболее вероятная скорость** (прак. | теор.): 462,5 | 450 м/с;

**Средняя скорость** (прак. | теор.): 529,6 | 542,41 м/с;

**Среднеквадратическая**: 612,08 м/с;

Сравнение всех 3 графиков (рис. 6):

*Рис. 6. Сравнительные графики при 3-х разных температурах*

Из графиков видно, что полученные гистограммы распределения близки с теоретическим распределением Максвелла во всех трёх случаях, что говорит о правильности выполнения вычислительного эксперимента. Тоже самое можно сказать и про характеристические скорости: полученные значения близки с теоретическими.

Также выполняет соотношение скоростей:

* для **наиболее вероятных** скоростей – 1,00:1,92:2,85;
* для **средних** скоростей – 1,00:1,99:3,01;
* **среднеквадратических** скоростей – 1,00:2,00:3,00

при 100 К, 400 К и 900 К соответственно, что подтверждает зависимость .

# Вывод

В ходе проделанной работы выполнено:

1. Создана молекулярно-динамическая программа для NVE ансамбля.
2. Построили гистограммы распределения по скоростям атомов идеального газа для разных температур.
3. Сравнили полученные гистограммы распределения с теоретическим распределением Максвелла – гистограммы близки с теоретическими.
4. Рассчитали характеристические скорости: наиболее вероятные, средние, среднеквадратические. Сравнили их с теоретически полученными значениями.
5. Получены верные соотношения скоростей от температуры как .

# Литература

1. Аксенова Е.В., Кршивицкий М.С. Вычислительные методы исследования молекулярной динамики. Санкт-Петербургский государственный университет. Санкт-Петербург. 2009 – 50 с.
2. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. Phys. Rev. – 1967 - Vol. 159, P. 98.
3. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: том 1. 1990 – 349 с.
4. Jones J.E. On the Determination of Molecular Fields. Proc. R. Soc. Lond., 1924, A 106 (738), pp. 463-477.
5. Васин А.С. Компьютерный эксперимент в физике. Нижний Новгород, ННГУ, 2006. – 44 с.
6. Гордеев И.П. Моделирование частиц в потенциале Леннарда-Джонса. Б03-909. 2020.
7. Богатиков Е.В., Битюцкая Л.А., Шебанов А.Н. Моделирование нанокластеров методом молекулярной динамики. Учебно-методическое пособие. Издательство Воронежского государственного университета, 2013.
8. Макогина Е.И., Учебно-методическое пособие к лабораторной работе №2.5 по дисциплине «Физический практикум». 2014.