

Лекция №13. Көпбөлшекті жүйенің микроскопиялық қасиеттерін Леннард-Джонс моделі үшін молекулалық динамика әдісімен моделдеу

Бөлшектер арасындағы өзара әсерлесу екібөлшекті Леннард-Джонс потенциалы арқылы жақсы сипатталады

$$\Phi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (35)$$

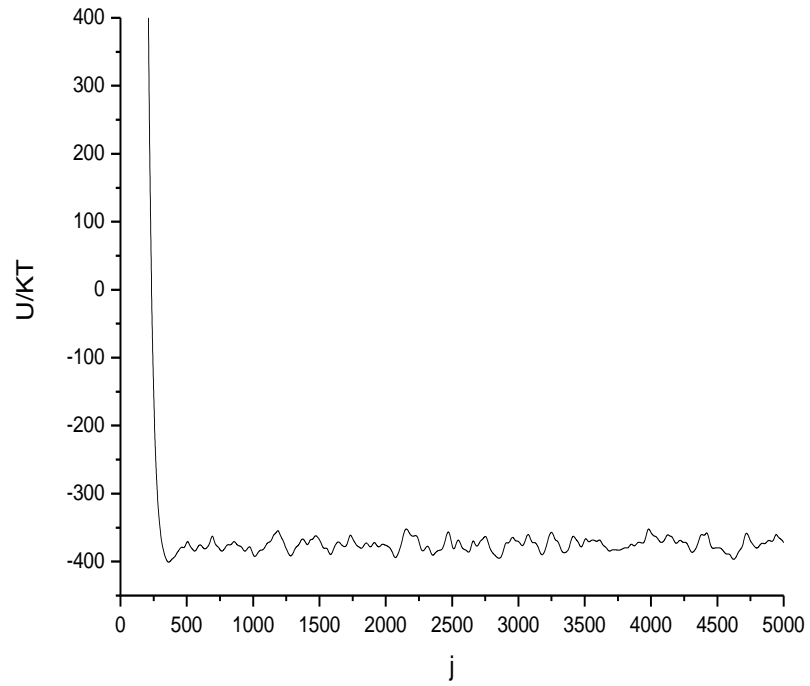
мұндағы ε және σ - энергия мен ұзындық өлшемдігіндегі тұрақтылар. ε шамасы $\Phi(r)$ потенциалды шұңқырдың тереңдігін анықтайды.

Нақты болу үшін ε мен σ мәндерін аргон үшін таңдайық. $N = 256$ бөлшектерді көлемі V МД-ұяшығына орналастырайық. Ұяшықтағы бөлшектер саны сақталу үшін периодты шекаралық шартты енгіземіз. Жүйенің үш параметрі – көлем, бөлшек саны және температура жиынтығы біз зерттейтін жүйенің күйін анықтайды.

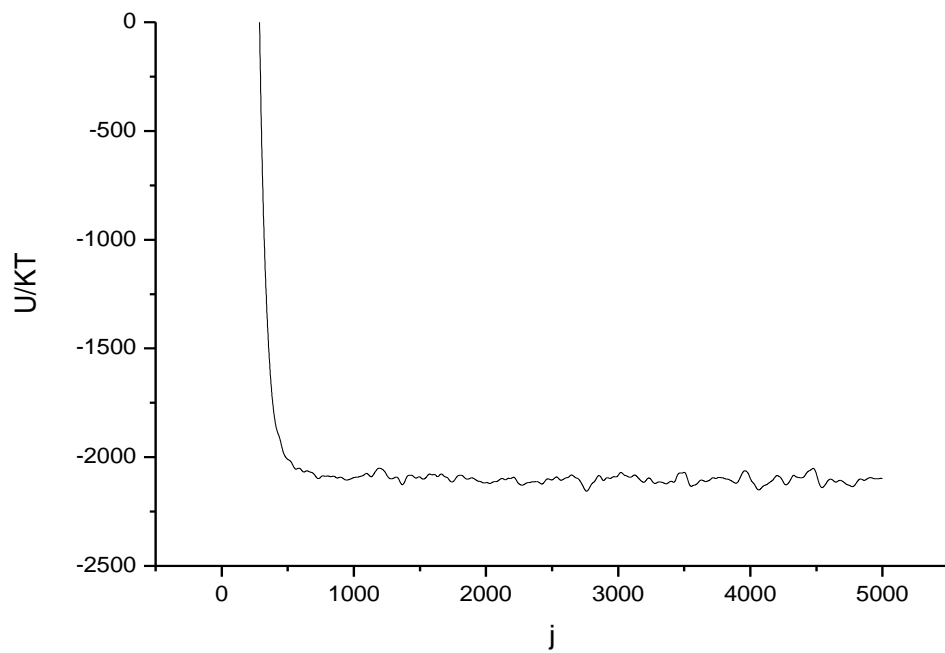
Компьютерлік моделдеу үшін барлық шамаларды нормаланған түрде көрсету ыңғайлы $R = \frac{r}{\sigma}$; $\Phi^*(R) = \frac{\Phi(r)}{k_B T}$; $T^* = \frac{k_B T}{\varepsilon}$, $\rho = \frac{V}{V^*}$, где $V = L^3$;

$V^* = N\sigma^3$; аргон атомы үшін $\sigma = 0.3405 \text{ нм}$, $\frac{\varepsilon}{k_B} = 119.8 \text{ К}$.

Біздің жүйені фазалық диаграмманың (T^*, ρ^*) екі нүктесінде: $(2.53, 0.636)$ және $(0.722, 0.83134)$ қарастырамыз. Келтірілген тығыздықтың осы мәндері үшін МД-ұяшықтың сызықтық өлшемі $L = 7.38$ және $L = 6.75$ болады. Айтылған параметрлер молекулалық динамика программасын қосу кезінде қолданылуы мүмкін. Жүйені моделдеу үшін Верле алгоритмі қолданылды. 1-суретте МД әдісімен моделдеу процесі кезіндегі фазалық траекторияның әртүрлі нүктелеріндегі жүйенің потенциалдық энергиясының эволюциясы ($k_B T$ бірлігінде) көрсетілген а) $T^* = 2.53, \rho^* = 0.636$; б) $T^* = 0.722, \rho^* = 0.83134$. Потенциалдық энергияны бақылағанда жүйенің толық релаксациясы $T^* = 0.722$ болған кезде баяулау. 2-суретте $T^* = 0.722, \rho^* = 0.83134$ болғандағы квадраттық орташа ығысудың уақыттан тәуелділігі көрсетілген. 3- суретте аргон сұйықтығындағы бөлшектер жылдамдығының нормаланған автокорреляциялық функциясының $\langle v(0)v(t) \rangle / v_T^2$ уақыттан тәуелділігі көрсетілген.

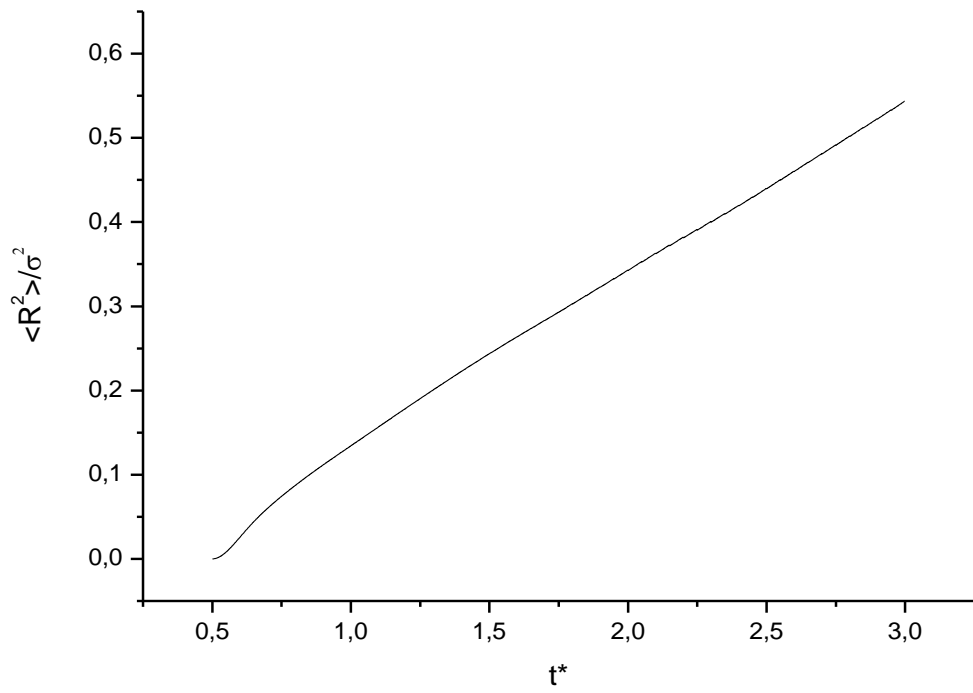


a) $T^* = 2.53, \rho^* = 0.636$

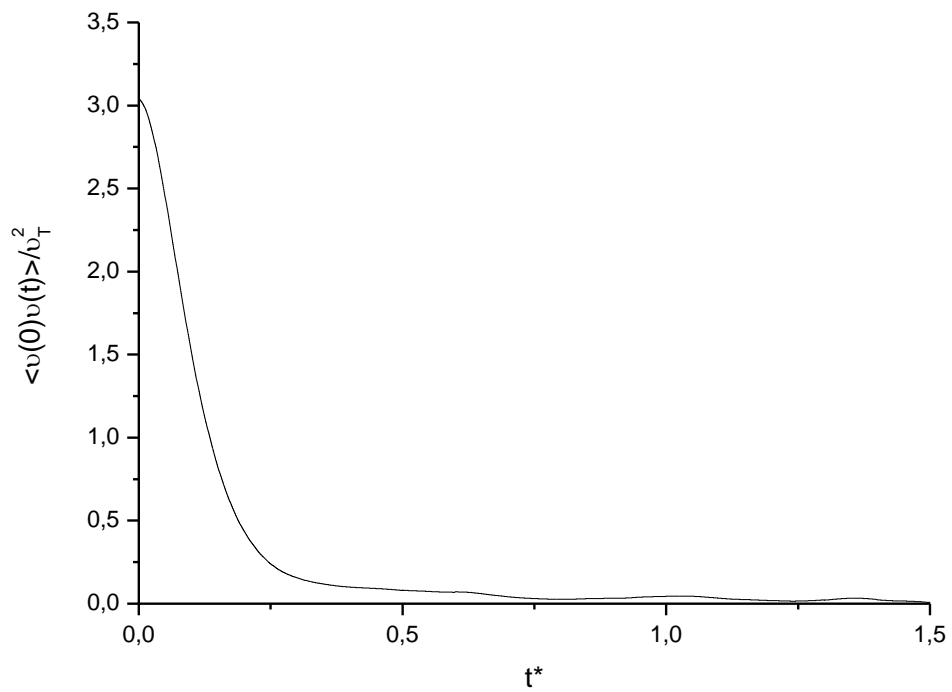


б) $T^* = 0.722, \rho^* = 0.83134$.

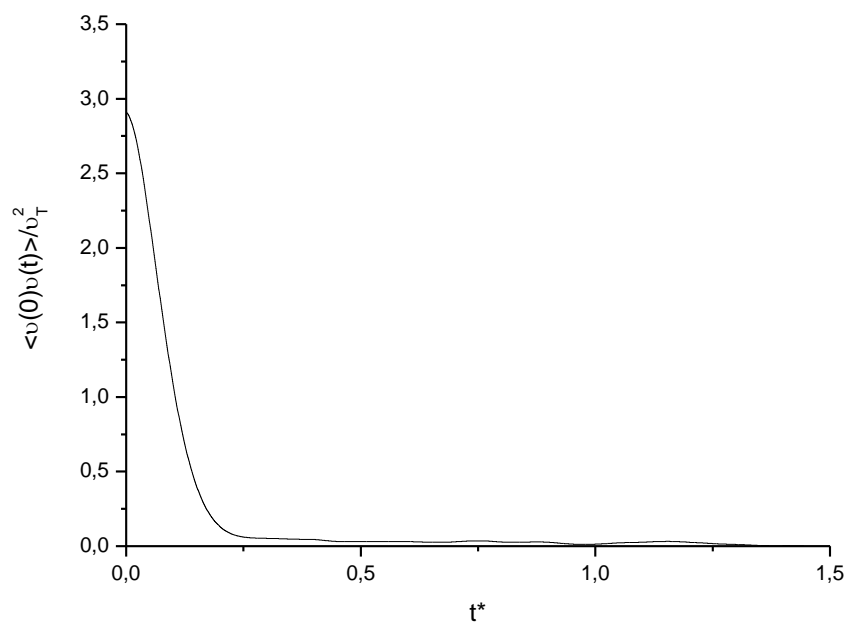
1 – сурет. Жүйенің потенциалдық энергиясының эволюциясы



2- сурет. Квадраттық орташа ығысудың уақыттан тәуелділігі



a) $T^* = 2.53, \rho^* = 0.636$;



б) $T^* = 1.43, \rho^* = 0.65$

3 – сурет. Сұйықтықтардағы бөлшектер жылдамдығының автокореляциялық функциясы