

Министерство образования и науки Российской Федерации
Российская академия наук
Московский государственный технический университет
им. Н.Э. Баумана
Физический институт им. П.Н. Лебедева
Центр прикладной физики МГТУ им. Н.Э. Баумана

**НЕОБРАТИМЫЕ ПРОЦЕССЫ
В ПРИРОДЕ И ТЕХНИКЕ**

ТРУДЫ ВОСЬМОЙ
ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

27–29 января 2015 года

Москва

Часть II

МГТУ им. Н.Э. Баумана

УДК 536.75
ББК 22.317

Н 52

Необратимые процессы в природе и технике: труды
Н 52 Восьмой Всероссийской конф. / Мин-во образования и
науки Рос. Федерации, Моск. гос. техн. ун-т им.
Н.Э. Баумана. – Москва : МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2015.

ISBN 978-5-7038-4105-1

Ч. II. – 240, [1] с.

ISBN 978-5-7038-4107-5 (Ч. II)

В трудах Восьмой Всероссийской конференции приведены
результаты, полученные авторами в области исследования
необратимых процессов в природе и технике.

Труды конференции предназначены для студентов, аспирантов и
научных работников.

УДК 536.75

ББК 22.317

ISBN 978-5-7038-4107-5 (Ч. II)

ISBN 978-5-7038-4105-1

© Центр прикладной физики
МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2015
© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2015

СЕКЦИЯ 2

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Руководитель секции - д.ф.-м.н., профессор

Мартинсон Леонид Карлович

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ МОЛЕКУЛ ВОДЫ НА ОСНОВЕ ТРЕХЧАСТИЧНОГО ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Б.Н.Галимзянов, А.В.Мокшин

Институт физики, Казанский федеральный университет,
кафедра вычислительной физики, г. Казань

В настоящее время на основе методов моделирования молекулярной динамики исследованы структурные характеристики сложных атомарных и молекулярных систем, таких как металлы, сплавы, гели, белковые соединения, вода. Несмотря на наличие большого числа методов исследования динамики частиц (атомов, молекул, ионов) компьютерное моделирование позволяет изучать характеристики системы только на ограниченном диапазоне температур и давлений. К примеру, более точное исследование структуры одноатомной модели воды через модифицированный потенциал Стиллинджера-Вебера возможен только в диапазоне температур $T \in [273; 373]K$. Это, прежде всего, подтверждается диаграммой зависимости плотности от температуры $\rho(T)$ [1, 2]. В связи с этим, усовершенствование и разработка потенциалов взаимодействия для различных систем, в том числе для воды, является актуальной задачей.

В связи с этим в данной работе нами выполнено исследование структурной характеристики одноатомной модели воды методом введения усовершенствованного эффективного потенциала межчастичного взаимодействия. В начальном этапе работы в качестве основного уравнения нами взят потенциал Стиллинджера-Вебера (1) [1-3], который состоит из парного и трехчастичного вклада:

$$U_{SW} = \phi_2(r) + \phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}),$$

$$\phi_2(r) = A\epsilon \left[B \left(\frac{\sigma}{r} \right)^p - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^q \right] \exp \left(\frac{\sigma}{r - r_{cut}} \right), \quad (1)$$

$$\phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}) = \lambda \epsilon [\cos \theta_{ijk} - \cos \theta_{ijk}^0]^2 \cdot \varphi(r_{ij}) \cdot \varphi(r_{ik}),$$

$$\varphi(r_{ij}) = \exp \left(\frac{\gamma \sigma}{r_{ij} - r_{cut}} \right) \quad \text{и} \quad \varphi(r_{ik}) = \exp \left(\frac{\gamma \sigma}{r_{ik} - r_{cut}} \right). \quad (2)$$

В данной работе вклады $\varphi(r_{ij})$ и $\varphi(r_{ik})$ усовершенствованы с добавлением распределения Гаусса. В итоге данные величины принимают следующий вид

$$\begin{aligned} \varphi_G(r_{ij}) &= \exp \left(-\frac{\gamma \sigma}{(r_{ij} - r_{cut})^2} - \frac{(r_{ij} - \sigma_g)^2}{2\delta^2} \right), \\ \varphi_G(r_{ik}) &= \exp \left(-\frac{\gamma \sigma}{(r_{ik} - r_{cut})^2} - \frac{(r_{ik} - \sigma_g)^2}{2\delta^2} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь величина σ и ϵ - размер и энергия связи молекул воды соответственно. Параметры A , B , p , q и θ_{ijk} взяты согласно работам [3, 4], величина $r_{cut} = 1.8\sigma$ и $\lambda = \chi/2\pi\delta$, r_{ik} и r_{ij} - расстояние между частицами с индексами i, j, k (где $i, j, k = 1..N$), величина θ_{ijk} - угол между ними. Параметры χ , δ , γ и σ_g являются подгоночными.

Расчет подгоночных параметров осуществляется через сопоставление радиальной функции распределения частиц $g(r)$ исследуемой системы с другими данными эксперимента или моделирования. Вычисление функции $g(r)$ осуществлялось на основе уравнения

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N} \frac{\Delta n(r)}{\Delta r}, \quad (4)$$

где величина $\Delta n(r)$ - показывает число частиц находящихся на расстоянии r друг от друга, V - объем системы.

Результаты. Нами выполнено моделирование одноатомной модели воды состоящей из $N = 1372$ частиц, взаимодействующих между собой в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Система была уравновешена при постоянной температуре $T = 298K$ и плотности $\rho_n \approx 1000 \text{ кг/м}^3$ с использованием термостата Нозе-Гувера.

На рис.1 представлены радиальные функции распределения частиц для одноатомной модели воды. Красными кружками представлена функция $g(r)$ для системы, полученной через потенциал U_{SW} , состоящий из уравнений (1) и (2). Зелеными квадратами обозначена модель воды с эффективным потенциалом U_{SW+G} , полученной через уравнения (1) и (3).

Введенный нами эффективный потенциал U_{SW+G} хорошо воспроизводит структурные характеристики одноатомной модели воды, которая подтверждается наличием хорошего согласия между функциями $g(r)$ [1, 2].

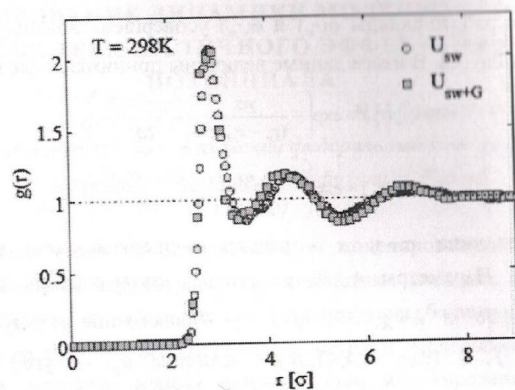


Рис. 1. Радиальные функции распределения частиц для одноатомной модели воды, рассчитанные при температуре $T = 298K$ через эффективные потенциалы U_{SW} и U_{SW+G} .

На рисунке 2 представлены энергии взаимодействия парных и трехчастичных вкладов потенциала U_{SW+G} при значениях угла $\theta_{ijk} = 10^\circ$ и для расстояния $r_{ik} = 1.1\sigma$ (где для удобства величина $r = r_{ij}$).

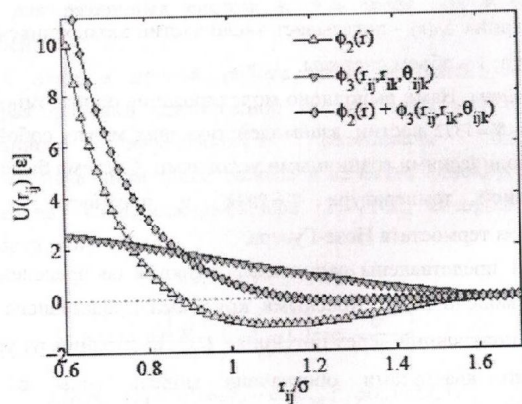


Рис. 2. Изменение энергии парного $\phi_2(r)$ и трехчастичного вклада $\phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk})$ потенциала U_{SW+G} с изменением расстояния r_{ij} (где $r = r_{ij}$) между частицами.

Для исследуемой нами системы были получены численные значения следующих подгоночных параметров: $\chi = 9.4$, $\delta = 0.69$, $\gamma = 0.12$ и $\sigma_g = 0.25\sigma$. Здесь параметры σ_g , γ и δ позволяют менять форму кривой трехчастичного вклада, в то время как величина χ влияет на высоту функции $\phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk})$. С увеличением расхождения между углами θ_{ijk} и θ_{iik} кривая $\phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk})$ «гасит» притяжение парного вклада $\phi_2(r)$ тем самым уменьшая сцепление между частицами в этом направлении. В итоге результирующая кривая $\phi_2(r) + \phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk})$ в основном состоит из энергии отталкивания.

Таким образом, зная функцию радиального распределения частиц исследуемой системы, с заданной температурой и плотностью, можно рассчитать параметры для любого эффективного потенциала. В данной работе, на основе функции $g(r)$ были получены численные значения параметров для трехчастичного вклада эффективного потенциала U_{SW+G} одноатомной модели воды. Кроме того, разработанные нами программные комплексы позволяют выполнить расчет эффективных полей для исследования более сложных систем, таких как колонии бактерий и динамики частиц в аэрогелях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-02-00335-а).

- [1] Molinero, V., Moore E.B., J. Phys. Chem. B **113**, 4008–4016 (2009).
- [2] Moore E.B., Molinero V., Nature **479**, 506–508 (2011).
- [3] Mokshin A.V., Galimzyanov B.N., J. Phys. Chem. B **116**, 11959 (2012).
- [4] Moore E.B., Molinero V., J. Chem. Phys. **130**, 244505 (2009);