

9. Oliver S.A., Willey R.J., Hamdeh H.H., Oliveri G., Busca G., *Scr. Metall. Mater.* 33 (1995) 1695.
10. Chen Q., Rondinone A.J., Chakoumakos B.C., Zhang Z.J., *J. Magn. Magn. Mater.* 194 (1999)
11. Liu C., Zou B., Rondinone A.J., Zhang Z.J., *J. Am. Chem. Soc.* 122 (2000) 6263.
12. Darul J., Nowicki W., *Radiat. Phys. Chem.* 78 (2009) S109.
13. Ohbayashi K., Khon K., Lida S., *J. Phys. Soc. Jpn.* 21 (1966) 2740.
14. Ohnishi H., Teranishi T., *J. Phys. Soc. Jpn.* 16 (1961) 35.
15. Hsing-Cheng Lu, Juu-En Chang, Pai-Haung Shih, Li-Choung Chiang, *J. Hazard Mater.* 150 (2008) 504.
16. Krupička S. and Novák P., in *Ferromagnetic Materials*, edited by E. P. Wohlfarth _North-Holland, New York, 1982_, Vol. 3, Chap. 4, p. 215.
17. Ab-initio study of electronic structure and magnetic properties of CuFe_2O_4 , Temuujin B., Tsogbadrakh N., Sangaa D., *Proceedings of Institute of Physics and Technology* № 42, 2015, Ulaanbaatar, Mongolia
18. Computational study of copper ferrite, Xu Zuo, Aria Yang, Carmine Vittoria and Vincent G. Harris, *J. Appl. Phys.* 99, 08M909

УДК 536.912, 536.92, 539.91

doi: 10.18.101/978-5-9793-0883-8-270-272

Расчет изотермической сжимаемости аргона методом молекулярной динамики при различных скоростях охлаждения

Е. И. Герман, Ш. Б. Цыдыпов¹

¹Бурятский государственный университет, Россия, Улан-Удэ, ул. Смолина 24а,
e-mail: Shulun@bsu.ru

Аннотация

Приведены результаты расчета изотермической сжимаемости аргона методом молекулярной динамики при изобарном охлаждении от 200 К до 15 К при давлении 40 атм. На температурных зависимостях изотермической сжимаемости при быстром (10^9 К/с) и относительно медленном (10^{12} К/с) охлаждении видны скачки, трактуемые как фазовые переходы.

Ключевые слова: изотермическая сжимаемость, аргон, молекулярная динамика, радиальные функции распределения, фазовые переходы.

Calculation of Isothermal Compressibility of Argon by Method of Molecular Dynamics at Various Cooling Rates

E. I. Herman, Sh. B. Tsydygov¹

¹Buryat state university, Russia, Ulan-Ude, Smolin Str. 24a,
e-mail: Shulun@bsu.ru

Abstract

Results of calculation of isothermal compressibility of argon have been obtained by the method of molecular dynamics at isobaric cooling from 200 K to 15 K with a pressure of 40 atm. Temperature dependences of isothermal compressibility at fast (10^9 K/s) and slow (10^{12} K/s) cooling demonstrate jumps treated as phase transitions.

Keywords: isothermal compressibility, argon, molecular dynamics, radial distribution functions, phase transitions

Теплофизические и другие свойства стеклообразных твердых тел во многом определяются структурой жидкости, которая фиксируется в области стеклования. Вместе с тем в настоящее время нет общепризнанной теории перехода жидкость – стекло, а также нет полной ясности в природе жидкого и стеклообразного состояний вещества. Построение строгой статистической теории встречает большие трудности. Успехи, достигнутые в последнее время, касаются лишь равновесных свойств простых жидкостей со сферически симметричным парным потенциалом взаимодействия. Поэтому, на данном этапе остается актуальным развитие моделей структуры жидкостей и стекол, основанных на численных и натуральных экспериментах.

Компьютерное моделирование позволяет исследовать закономерности процессов протекающих в различных системах, воспроизведение которых в реальных системах зачастую затруднено или вовсе не представляется возможным. В ходе МД-расчета можно получить структурные корреляционные функции в частности радиальную функцию распределения с помощью, которой можно вычислить все термодинамические свойства системы. Описание системы на основе функций распределения полностью эквивалентно распределению Гиббса, так как следует из него [1]. Поэтому знание молекулярных функций распределения позволяет определить весь тот набор термодинамических параметров системы, что и с помощью самого распределения Гиббса.

Для численного моделирования системы частиц аргона нами использован метод молекулярной динамики, суть которого заключается в пошаговой корректировке траекторий частиц системы путем решения уравнений классической динамики для каждой частицы [2]:

$$q_i(t + \Delta t) = v_i(t)\Delta t - \frac{1}{2m_i} \sum_j^{N-1} \nabla U(ij)(\Delta t)^2 + q_i(t)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) - \frac{1}{m_i} \sum_j^{N-1} \nabla U(ij)\Delta t$$

где q – координата частицы, v – скорость, U – потенциал межчастичного взаимодействия.

Для описания взаимодействия частиц системы использован парный потенциал Леннарда-Джонса:

$$U(r) = 4\varepsilon \left(\left[\frac{\sigma}{r} \right]^{12} - \left[\frac{\sigma}{r} \right]^6 \right) \quad (1)$$

с глубиной потенциальной ямы для аргона $\varepsilon / k_B = 119,8$ К, диаметром координационной сферы $\sigma = 3,405 \cdot 10^{-10}$ м [3], k_B – постоянная Больцмана. Инициализация моделируемой системы производилась в кубе периодичности размером $10 \times 10 \times 10$ частиц, при температуре 200 К и концентрации частиц $n = 3 \cdot 10^{28}$ м⁻³. Давление и температура при этом поддерживаются постоянными до тех пор, пока флуктуации плотности системы не станут происходить в пределах 1% от заданной.

Траектория каждой частицы состоит из последовательностей шагов с длиной пропорциональной интервалам времени Δt . Последовательное смещение на один шаг всех частиц системы под действием межчастичных сил согласно потенциалу (1), составляют одну итерацию. Через каждые 10000 итераций, соответствующих времени движения системы 10^{-11} сек., приведенная температура $T^* = kT/\varepsilon$ понижалась так, чтобы обеспечить необходимую постоянную скорость охлаждения системы от начальной температуры 200 К до 15 К. Нами, моделировались процессы охлаждения системы со скоростями 10^{12} и 10^9 .

Ниже приводятся результаты изучения температурной зависимости изотермической сжимаемости системы частиц аргона в ходе компьютерного эксперимента по изобарному быстрому и относительно медленному охлаждению этой системы от 200 К до 15 К при давлении 40 атм. Быстрое охлаждение системы производилось со скоростью 10^{12} К/с, а медленное (относительно систем со сложной структурой) охлаждение – со скоростью 10^9 К/с.

После каждых 10000 итераций рассчитываются плотность системы ρ : $\rho = m \cdot n$ где m – масса частицы, затем рассчитывается давление p по формуле статистической физики жидко-

$$p = nkT - \frac{4\pi n^2}{6} \int_V g(r) \frac{dU(r)}{dr} r^3 \cdot dV$$

стей [4-5]:

По полученным значениям давления p и плотности ρ можно определить их приращения Δp и $\Delta \rho$, что дает возможность вычислить изотермическую сжимаемость системы частиц. В общем случае

$$\beta = \frac{1}{\rho} \left(\frac{d\rho}{dp} \right)_T$$

изотермическая сжимаемость определяется по формуле

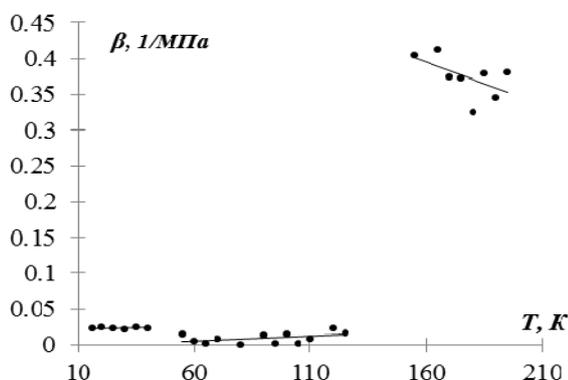
Для определения приращения плотности $\Delta \rho$ при приращении давления на Δp при постоянной температуре можно провести серию компьютерных экспериментов с термостатным расширением или сжатием системы, однако реализация таких экспериментов встречает большие трудности в плане инициализации равновесной системы при низких температурах.

Поэтому, нами использован другой метод, предполагающий получение изобар с достаточно небольшим различием давлений. Так, нами проведено моделирование охлаждения системы с указанными выше скоростями для систем, находящейся под давлением 39 и 40 атм. По разнице плотностей в одних и тех же температурных точках можно получить изотермическую сжимаемость для системы, находящейся под давлением 39,5 атм:

$$\beta = \frac{1}{\rho_{39,5}} \frac{\rho_{40} - \rho_{39}}{\Delta p}$$

где ρ_{40} и ρ_{39} плотности систем при 40 атм и 39 атм при одинаковых температурах.

На рисунке 1 приведены значения изотермической сжимаемости β для аргона полученные при относительно медленном охлаждении со скоростью 10^9 К/с. По характеру температурной зависимости изотермической сжимаемости β на рисунке можно выделить газовую, жидкую и кристаллическую фазы моделируемой системы частиц аргона.



1. Изотермическая сжимаемость аргона по данным компьютерных экспериментов, моделирующих охлаждение со скоростью 10^9 К/с

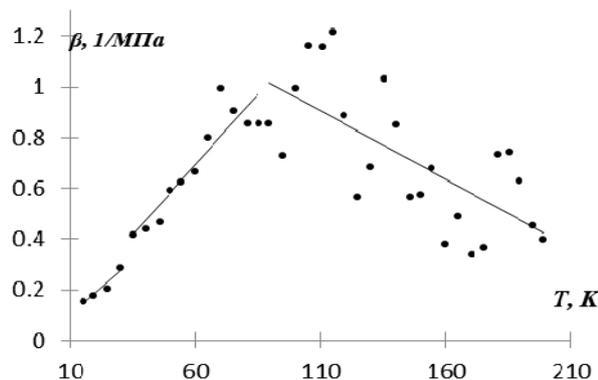


Рис. 2. Изотермическая сжимаемость аргона по данным компьютерных экспериментов, моделирующих охлаждение аргона со скоростью 10^{12} К/с.

На рис. 2 представлен ряд полученных значений β при охлаждении аргона со скоростью 10^{12} К/с. Температурная зависимость сжимаемости β на рисунке испытывает резкое изменение в окрестностях точки ~ 90 К. Такое резкое изменение на наш взгляд характеризует неравновесный процесс при быстром охлаждении моделируемой системы частиц аргона. Возможно это связано с переходом: неравновесный газ (перенасыщенный пар) – неравновесная жидкость (смесь газа с кластерами жидкости). Также можно отметить переход в окрестностях ~ 30 К, вероятно соответствующий переходу неустойчивой жидкости в стеклообразную фазу.

Таким образом, расчет изотермической сжимаемости в моделируемой системе частиц аргона при разных скоростях охлаждения позволяет выявить структурные особенности моделируемой системы и требует дальнейшего подробного исследования.

Работа выполнена при поддержке БГУ грант № 3822, при поддержке РФФИ грант № 15-02-08204а.

Литература

1. Мартынов Г.А. Классическая статистическая механика. Теория жидкостей. Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2011. – 328 с.
2. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в физике. – М.: Наука, 1990 – 176 с.
3. Rahman A. Liquid structure and self-diffusion. // J.Chem.Phys. 1966. Vol.45, №7. P.2585-2592.
4. Крокстон К. Физика жидкого состояния. М.: Мир, 1978. 400 с.
5. Физика простых жидкостей. Статистическая теория. / Под ред. Г. Темперли. М.:Мир, 1971. 308 с.