УДК 538.931

Исследование коэффициентов переноса в сложных средах методом классической молекулярной динамики

Е.М. Кирова

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Объединенный институт высоких температур РАН

Для понимания процессов, происходящих в сложных средах, необходимо знать коэффициенты переноса во всем диапазоне изменения внешних параметров [1, 2]. Во многих случаях непосредственные экспериментальные измерения являются крайне затруднительными [3]. Данная работа посвящена разработке методики вычисления коэффициентов диффузии и вязкости методом молекулярной динамики. Компьютерное моделирование и расчеты коэффициентов переноса были выполнены как для леннард-джонсовской системы, так и для более сложных систем, включая пылевую плазму.

Расчеты самих коэффициентов переноса проводились двумя способами: методом Грина-Кубо с построением автокорреляционных функций и через классические формулы Ньютона и Эйнштейна-Гельфанда [1, 2, 3].

Ниже представлены формулы Грина-Кубо для коэффициента диффузии и вычисления сдвиговой вязкости:

$$D = \int_0^\infty \langle \upsilon_1^x(0)\upsilon_1^x(\tau)\rangle d\tau$$

где верхний индекс x означает x-компоненту вектора, τ - время; угловые скобки означают усреднение по равновесному ансамблю.

$$\eta = \lim_{\varepsilon\to+0}\lim_{V\to\infty}\frac{1}{Vk_BT}\int_0^\infty e^{-\varepsilon\tau}\langle \pi^{xy}(0)\pi^{xy}(\tau)\rangle d\tau$$

где η - коэффициент сдвиговой вязкости, π^{xy} - компоненты тензора потока полного импульса.

Результаты представлены в форме графиков, получены асимптотические значения коэффициентов переноса при уменьшении шага интегрирования и при возрастании числа частиц. Показана согласованность значений коэффициентов переноса, полученных с помощью различных методов расчета. Молекулярно-динамическое моделирование было выполнено на основе программного пакета LAMMPS.

Литература

1. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. – М.:Наука,1971. – 417с.

2. *Полухин В.А., Ухов В.Ф., Дзугутов М.М.* Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов. – М.: Наука,1981. – 324с.

3. *Рудяк В.Я., Белкин А.А*. Моделирование коэффициентов переноса наножидкостей. – Наносистемы: физика, химия, математика. – 2010. – Том 1. – № 1. – С. 156-177.