

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ПРИМЕСЕЙ МОЛЕКУЛ В НАНООБЪЕМАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПРИ ДЕЙСТВИИ СИЛЫ КАЗИМИРА

Бабарин С. С.

(Россия, Москва)

Рассматриваются процессы переноса примесей в нанобъемах. Математическая модель основана на системе уравнений Ньютона, включающей потенциал Леннарда–Джонса и силу Казимира. Цель работы состоит в изучении свойств динамической системы под действием постоянного возмущения, вызванного силой Казимира.

Введение. Взаимодействие примесей с внутренней поверхностью нанобъемов под действием силы Казимира является актуальной задачей математического и компьютерного моделирования и современных исследований в области нанотехнологий. С помощью метода молекулярной динамики можно с высокой точностью описать поведение данной динамической системы и учесть нелинейные эффекты, в частности, силу Казимира. Подобные задачи рассматривались в работах [1, 2], а в работе [3] проведены исследования силы Казимира для различного вида поверхностей.

Модель. Для моделирования взаимодействия частиц примеси запишем систему уравнений Ньютона:

$$m_i \frac{dV_i}{dt} = F_S^i, \quad (1)$$

где m_i — масса, V_i — скорость, F_Σ^i — суммарная сила, действующая на частицу с номером i , N — число частиц. Начальными условиями являются скорость и координаты молекул.

Решением системы уравнений (1) являются координаты скорости и ускорения каждой молекулы в каждый момент времени. Одним из методов, позволяющих проинтегрировать данную систему с высокой точностью, является скоростная, самостартовая форма алгоритма Верле [4].

$$S_{n+1} = S_n + V_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n (\Delta t)^2 + O[(\Delta t)^3], \quad (2)$$

$$V_{n+1} = V_n + \left(\frac{a_{n+1} + a_n}{2} \right) \Delta t + O[(\Delta t)^2]. \quad (3)$$

Здесь S_n — координата, V_n — скорость, a_n — ускорение частицы на шаге n , Δt — шаг по времени. В момент времени $t=0$ скорость и координаты молекул являются случайными величинами и задаются в соответствии с заданным распределением по скоростям молекул с учетом их массы и температуры среды. Глобальная погрешность алгоритма Верле имеет третий порядок по Δt для координаты (2) и второй порядок по Δt для скорости (3).

Составляющая ускорения частиц описывается потенциалом Леннарда-Джонса:

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

где ε , σ — параметры потенциала, зависящие от типа вещества, r — расстояние между двумя сталкивающимися частицами; и действием силы Казимира:

$$F(h) = -\frac{\pi^3 d^2 \hbar c}{240 h^4}. \quad (5)$$

Здесь \hbar — постоянная Планка, c — скорость света, h — расстояние между молекулой и ближайшим основанием, имеющим зеркальное отражение, d — диаметр молекулы.

Таким образом, ускорение частиц, с учетом выражений (4) и (5), может быть представлено следующим образом:

$$a = \begin{cases} \frac{1}{m} [F(h) - \nabla U_{\Sigma}(r)], & F(h) > 0, \quad \nabla U_{\Sigma}(r) \neq 0 \\ -\frac{1}{m} \nabla U_{\Sigma}(r), & F(h) = 0, \quad \nabla U_{\Sigma}(r) \neq 0 \\ \frac{1}{m} F(h), & F(h) > 0, \quad \nabla U_{\Sigma}(r) = 0 \\ 0, & F(h) = 0, \quad \nabla U_{\Sigma}(r) = 0 \end{cases}$$

где m — масса частицы, $\nabla U_{\Sigma}(r)$ — градиент суммарного потенциала Леннарда–Джонса, в случае столкновения более двух частиц, a — ускорение.

Результаты. Рассмотрим параллелепипед высотой 10 нм и площадью оснований 10 мкм². Поместим в него 500 молекул паров спирта C₂H₅ОН при температуре среды 290К. Диаметр молекулы составляет 4.48А. Параметры потенциала Леннарда–Джонса [5]: $\varepsilon/k_{Boltz} = 391\text{К}$, $\sigma = 4.455\text{А}$. Сделаем 1000 шагов интегрирования с временным шагом $dt = 10^{-13}$. Модуль силы Казимира для данного случая равен 8.9×10^{-14} Н.

Случай, при котором сила Казимира отсутствует, не представляет особого интереса. Функция распределения молекул по скоростям не меняется, система не эволюционирует, поскольку нет постоянного воздействия на частицы. Траектории частиц являются прямолинейными, средняя скорость постоянна. Малые изменения данных характеристик могут быть вызваны только столкновениями молекул, но при этом система остается в состоянии равновесия. Поэтому рассмотрим случаи, при которых движение молекул не является прямолинейным.

На рис. 1 можно наблюдать динамику изменения функции распределения, выраженную в отклонениях средней скорости от наиболее вероятного значения, а также изменения количества молекул, обладающих соответствующими скоростями. При этом вектор силы Казимира направлен к ближайшему основанию параллелипеда.

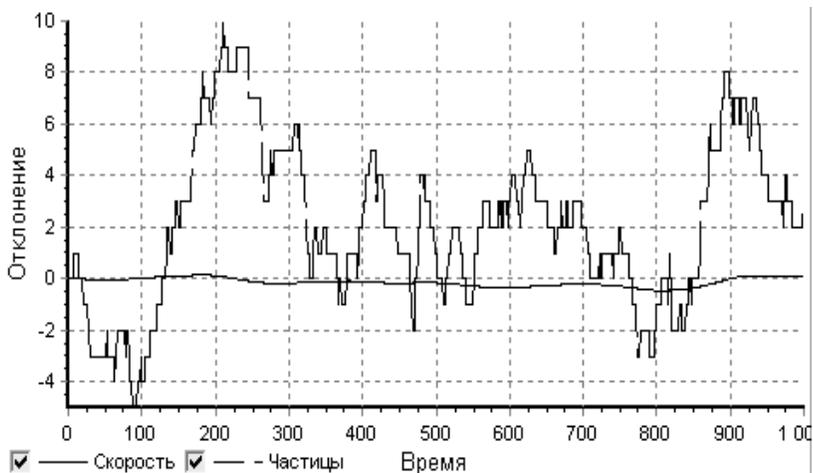


Рис. 1. Отклонения средней скорости и числа молекул паров спирта относительно наиболее вероятных значений

Сплошная линия соответствует отклонению средней скорости молекул, что выражается в смещении равновесной функции распределения вдоль оси скоростей во времени, а колебание числа частиц, обладающих наиболее вероятной скоростью в окрестности наиболее вероятного значения, отражено прерывистой линией на рис. 1. Таким образом, функция распределения смещается как вдоль оси скоростей, так и вдоль оси, определяющей количество частиц, имеющих соответствующие скорости. Конечный фрагмент положения графика функции распределения можно наблюдать на рис. 2.

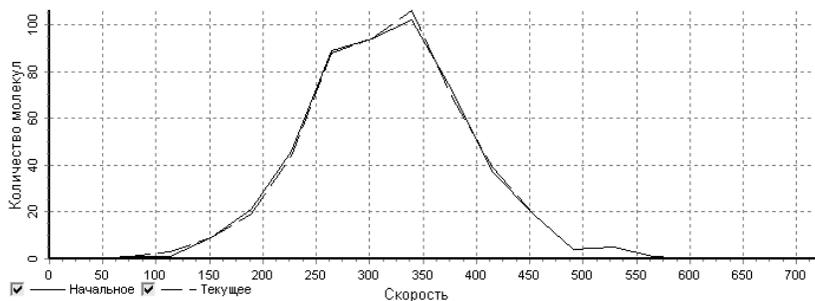


Рис. 2. Функция распределения по скоростям в начальный момент времени – сплошная линия, и в конечный – пунктирная линия

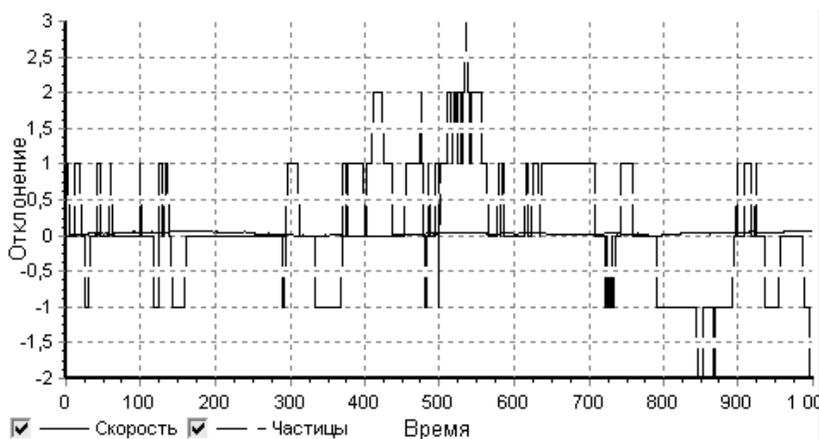


Рис. 3. Отклонения средней скорости и числа молекул паров спирта относительно наиболее вероятных значений при случайном направлении вектора силы Казимира

Аналогичная динамика отклонения скорости и числа частиц наблюдается при направлении вектора силы Казимира к центру параллелепипеда. Необходимо отметить, что получаемые результаты зависят от начальных условий, а характерный вид результатов представлен на (рис. 1, 2).

Основное отличие результатов на рис. 1 и рис 3 заключается в уменьшении амплитуды и частоты отклонений, что вызвано

случайностью направления вектора силы Казимира на каждом временном шаге.

Характерный вид полной энергии для данного числа частиц представлен на рис. 4.

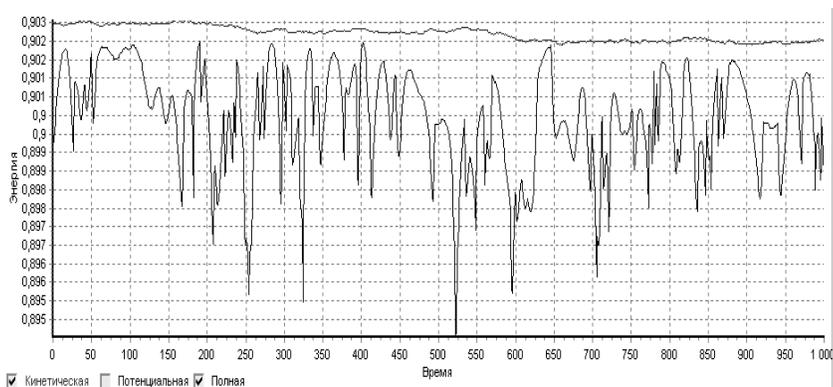


Рис. 4. Кинетическая и полная энергия системы, 10^{-23} Дж

Верхняя кривая на рис. 4 соответствует суммарной кинетической энергии системы, а нижняя кривая – полной энергии, осцилляция которой вызвана постоянным изменением потенциальной энергии при действии силы Казимира и потенциала взаимодействия.

Заключение. Сила Казимира оказывает влияние на взаимодействие частиц примесей в замкнутых объемах, типа параллелепипеда. Проведенные численные эксперименты показали наличие изменения статистических характеристик динамической системы, что выражалось в эволюции равновесной функции распределения, средней скорости и энергии системы. В отличие от потенциала Леннарда–Джонса, данная сила постоянна и оказывает постоянное влияние на траекторию молекул вне зависимости от взаимного расположения частиц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бабарин С.С. Исследование особенностей процесса переноса примесей различных веществ в микрообъемах с использованием метода Монте-Карло и молекулярной динамики // Материалы международной научной молодежной конференции, 20–25 сентября. — Таганрог: Изд-во ТРГУ, 2004. — С. 54–58
2. Babarin S., Modeling of influence of the Casimir force on the distribution laws of molecules in micro volumes // VI International Congress on Mathematical Modeling . — University of Nizhny Novgorod, 2004. — P. 185.
3. H. Ahmedov, I.H. Duru, Casimir forces between surfaces close to each other // Journal of Mathematical Physics. — Vol. 44. — Num. 12, 2003. — P. 5487–5503.
4. Поршнев С.В. Компьютерное моделирование физических систем с использованием пакета MathCAD. — М.: Горячая линия – Телеком, 2004. — стр.74.
5. Молекулярная теория газов и жидкостей / Дж. Гиршфельдер, Ч. Кергисс, Р. Берд, пер. с англ. под ред. Е.В.Ступоченко. — изд-во иностранной литературы. — Москва, 1961. — 915 с.

THE MODELING OF TRANSPORT PROCESS OF MOLECULES ADMIXTURE INSIDE NANOVOLUMES USING THE METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS WITH CASIMIR FORCE OPERATION

Babarin S. S.

(Russia, Moscow)

Consider transport process of admixtures in nanovolumes. Mathematical model is based on a system of Newton's equations, including the potential of Lennard-Jones and Casimir force. The object of exploration is to study the properties of dynamic system, constantly stressed by Casimir force.