

Максим Шайтанов,
студент 1 курсу магістратури факультету фізико-математичної,
комп'ютерної та технологічної освіти
Наук. керівник: **В.Я. Білошапка** (БДПУ)

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМІЧНЕ ВИВЧЕННЯ КІНЕТИЧНИХ КОЕФІЦІЄНТІВ МЕТАЛУ В МЕТАСТАБІЛЬНИХ СТАНАХ

Молекулярно-динамічний підхід дозволяє простежити повні траєкторії кожної з частинок мікросистеми, чисельно виміряти залежні від часу рівноважні і нерівноважні властивості мікросистеми як цілого. В результаті з'являється можливість визначення різних параметрів, пов'язаних з кореляційними функціями, таких, наприклад, як коефіцієнти дифузії, зсувної (динамічної) і кінематичної в'язкостей, теплопровідності. Для визначення даних коефіцієнтів можуть використовуватися співвідношення Ейнштейна, формули Гріна-Кубо і їх комбінація [1].

Дана робота присвячена вивченню кінетичних коефіцієнтів металу в метастабільних станах на основі комп'ютерного моделювання фізичного процесу і підрахунку коефіцієнтів металу в програмному середовищі Matlab за допомогою реалізованих алгоритмів обчислення, які ґрунтуються на вказаних вище формулах.

Коефіцієнт дифузії мікросистеми по співвідношенню Ейнштейна визначається наступним чином:

$$D = \frac{1}{6N} \frac{1}{t} \left\langle \sum_i [r_i(t_0 + t) - r_i(t_0)]^2 \right\rangle, \quad t = N\text{STEPS} \cdot \Delta t,$$

$$i = 1..N,$$

де $N\text{STEPS}$ - число кроків від початку підрахунку, t_0 - початковий момент часу при розрахунках коефіцієнтів, $\langle \rangle$ - усереднене значення по станам системи.

Коефіцієнт зсуву в'язкості визначається формулою:

$$\eta = \frac{m^2}{2k_B T V} \frac{1}{t} \left\langle \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} \left[\sum_i (r_{i,\alpha}(t_0 + t) \cdot v_{i,\beta}(t_0 + t) - r_{i,\alpha}(t_0) \cdot v_{i,\beta}(t_0)) \right]^2 \right\rangle,$$

де $\alpha\beta = xy, yz, zx$, V - обсяг досліджуваної системи, k_B - стала Больцмана, T - температура.

ЛІТЕРАТУРА

1. Rapaport, D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulation – Cambridge University Press, 2004.