УДК 533.72

Разработка моделей сечений столкновений молекул с учетом реальных потенциалов взаимодействия

А.В. Басалаев[1], В.Ф. Цибульский[1,2], Д.О. Михайлов[2], П.В. Шувалов[1,2], А.П. Потапов[1], Н.А. Зименков[2]

[1]Московский физико-технический институт (Государственный университет), [2]НИЦ «Курчатовский институт»

Для решения задач физической кинетики применяется уравнение Больцмана, где в правой части стоит интеграл столкновений, который необходимо учитывать и численно моделировать. В частности, необходимо численно рассчитывать дифференциальное сечение рассеяния в зависимости от различных входных параметров (потенциала взаимодействия, относительной скорости столкновения частиц). Для решения данной задачи используется т.н. «бросковый метод». Целью данной работы является вычисление при помощи компьютерного моделирования дифференциального сечения рассеяния молекул сильно разреженного одноатомного газа Ne при столкновениях при комнатной температуре. Задача предполагается трехмерной.

При моделировании столкновения предполагается, что частицы налетают друг на друга с одной и той же относительной скоростью, много меньше релятивисткой. Выборка составляет 700 тыс. частиц. Число узлов вокруг углов, в которые рассеиваются частицы – 500 (один угол рассеивания – один узел). Задача моделируется в безразмерных величинах. Итоговая блок-схема программы представлена на Рис 1. Программа реализована на C++.

Начальные координаты частиц задаются случайно. Частицы распределяются равномерно по осям X и Y при кол-ве частиц более 1000. Расчет траектории производится на основе уравнений движения при учете взаимодействия между частицами на основе потенциалов Леннард-Джонса и Букингема численно методом Эйлера и методом Рунге-Кутты четвертого порядка. При столкновении частиц проверяются на выполнение З.С.М.Э и З.С.И. и, в случае невыполнения, траектория пересчитывается с меньшим шагом по времени. Примеры вида рассчитанных программой траекторий приведены на Рис.2 (рассеивающий центр находится в начале координат, возможны и иные типы траекторий, но они встречаются пренебрежимо реже).

Для построения зависимости сечения рассеяния от азимутального угла используется неравномерное разбиение оси угла отклонения на узлы (ближе к нулю увеличивается частота узлов). Зависимость количества частиц от угла отклонения представлена на Рис.3 (слева – случай $\theta < 0{,}12$, справа – случай $0{,}12 < \theta < \pi$)).

При указанных условиях в диапазон $0 < \theta < 0.5$ попало 504000 точек из 700000.

Итоговые результаты зависимости логарифма дифференциального сечения рассеяния от угла представлены ниже (N=700000, потенциал Леннард-Джонса) представлены на Рис.4. В дальнейшем планируются следующие шаги развития программы:

- Расчет зависимости логарифма сечения рассеяния от угла рассеяния для двухатомного газа, молекулы которого представляются жестким ротатором
- Автоматизация (увеличение или уменьшение) шага по времени при расчете траектории в зависимости от угла отклонения частицы при двух последовательных итерациях расчета
- Построение зависимости логарифма сечения рассеяния частиц от угла рассеяния и относительной скорости частиц (трехмерный график)

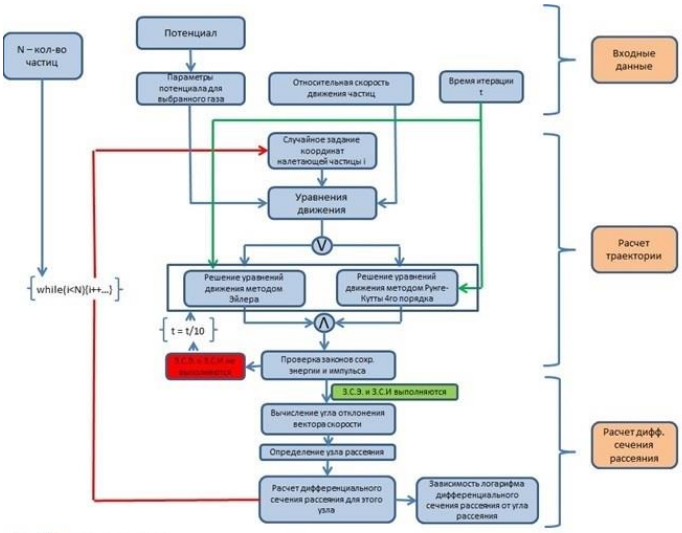

Рис. 1 Блок-схема программы

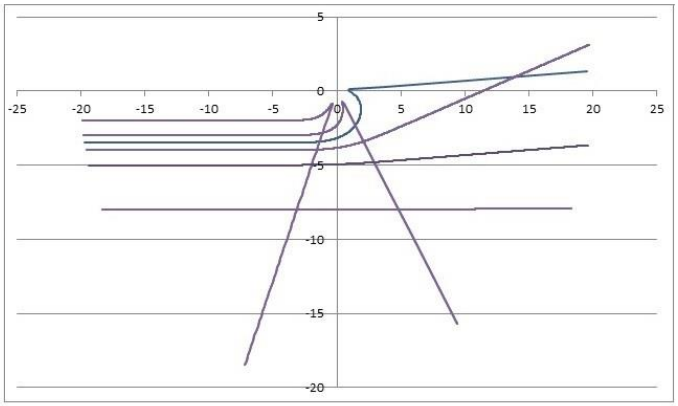

Рис. 2 Траектории частиц

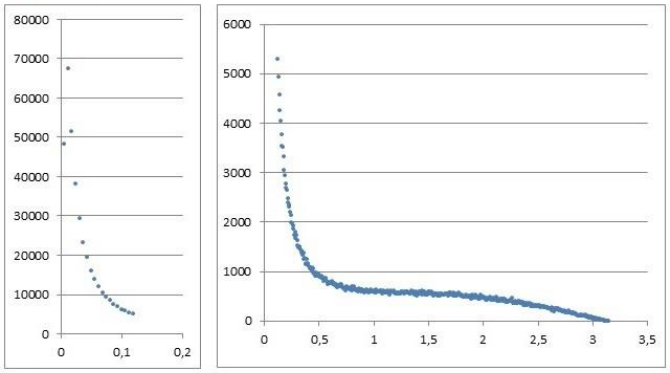

Рис. 3 Распределение частиц по углам

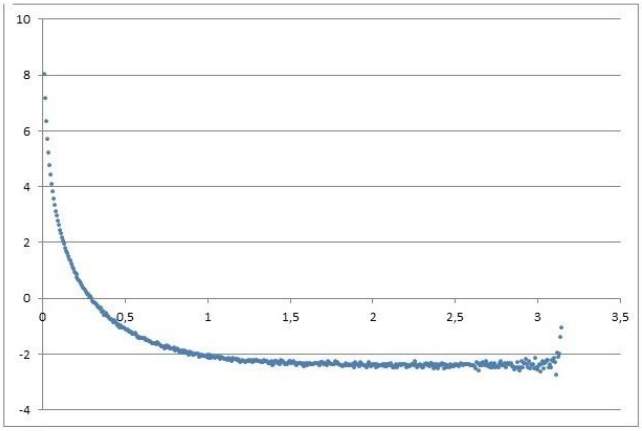

Рис. 4 Итоговые результаты

Литература

1. *Felix Sharipov, Guilherme Bertoldo*, “Numreical solution of the linearized Boltzmann equation for an arbitrary intermolecular potential”. Journal of Computational Physics 228 (2009) 3345-3357
2. *R.A. Buckingham* “The Classical Equation of State of Gasesous Helium, Neon and Argon”. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 168 (1938)
3. *Петров И. Б., Лобанов А.И.* “Лекции по вычислительной математике”, Интернет-Университет Информационных технологий; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006 – 523с., ISBN 5-94774-542-9 (БИНОМ.ЛЗ), с. 186