

Л.6 Основні характеристики систем, що можна обрахувати в комп'ютерних симуляціях

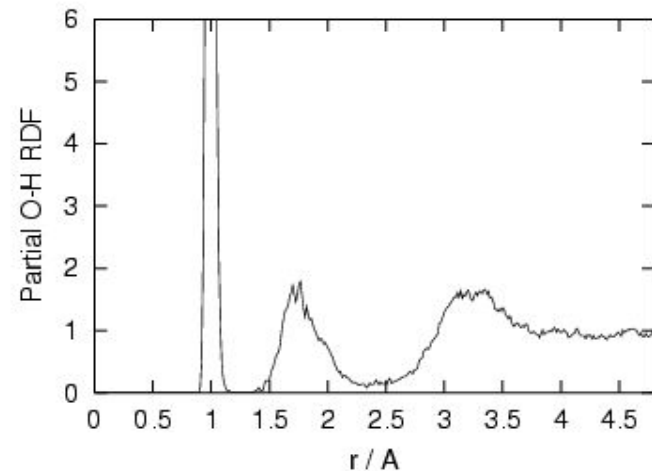
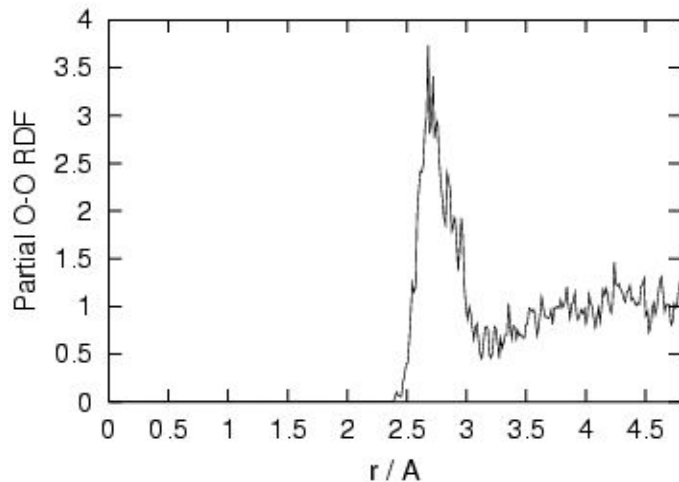
Парна функція розподілу $g(r)$:

Ймовірність знайти частинку на відстані r від центральної частинки

Основні властивості $g(r)$:

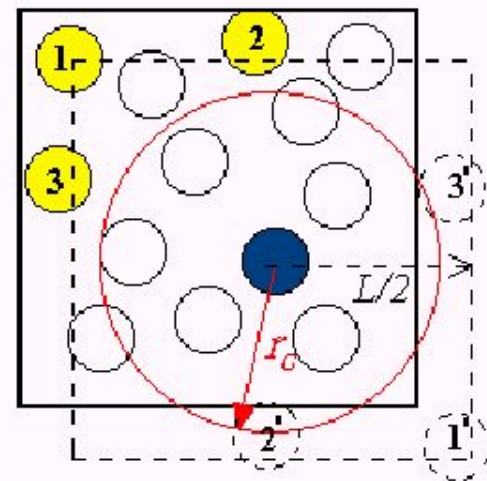
- а) на малих r (менших за діаметр частинки функція $g(r)$ рівна нулю;
- б) різкий перший максимум на першій координаційній сфері;
- в) на великих відстанях прямує до 1.

Функції розподілу для води:



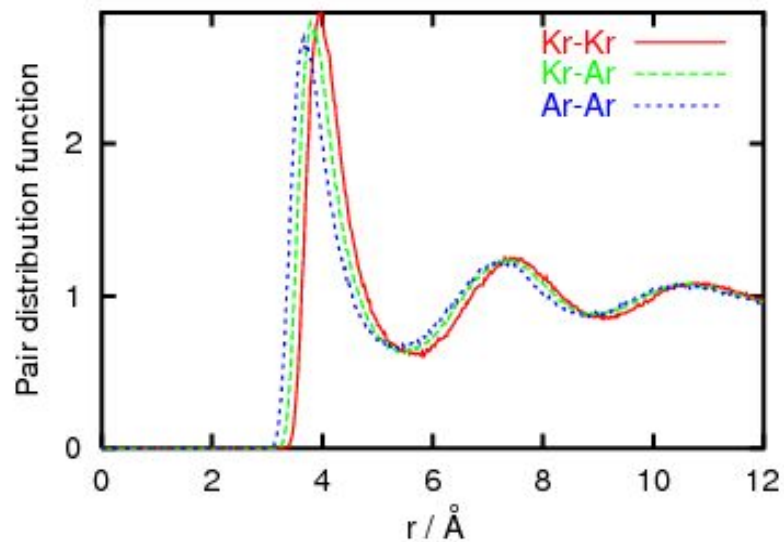
Розрахунок функцій розподілу

1. Робиться цикл по N частинках : $I=1,N$
2. Розраховуються відстані R_{ij} між I -ю та всіма іншими частинками
3. Враховуються періодичні граничні умови
4. При попаданні R_{ij} у проміжок між r і $r+\Delta r$ сума збільшується на 1
5. Кінцеву сумарну функцію від r пронормувати на об'єм між r і $r+\Delta r$ та усереднити на N частинок

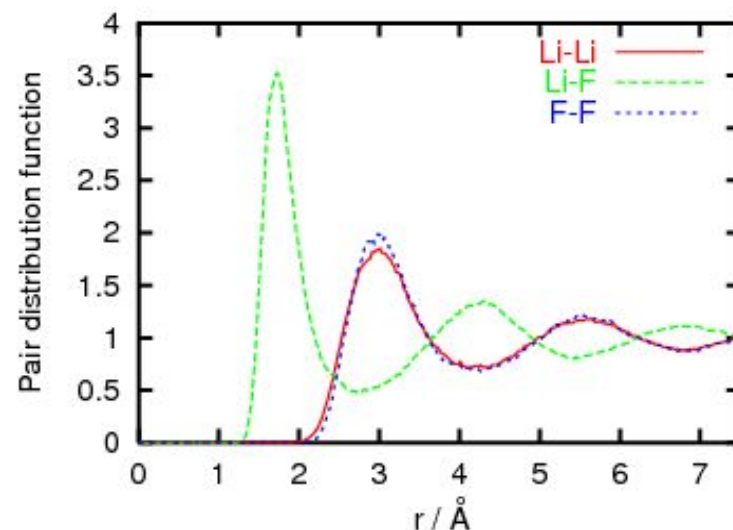


Бінарні системи

Ленард-Джонсівська
суміш



Іонний розплав LiF



$$n_{ij}(r) = \frac{4\pi N_i}{V} \int_0^r g_{ij}(r') r'^2 dr'$$

Біжуче (залежне від
відстані) число сусідів
і-го сорту навколо
частинок j-го сорту

Розрахунок інших величин за допомогою функцій розподілу

Потенціальна енергія системи з парними взаємодіями:

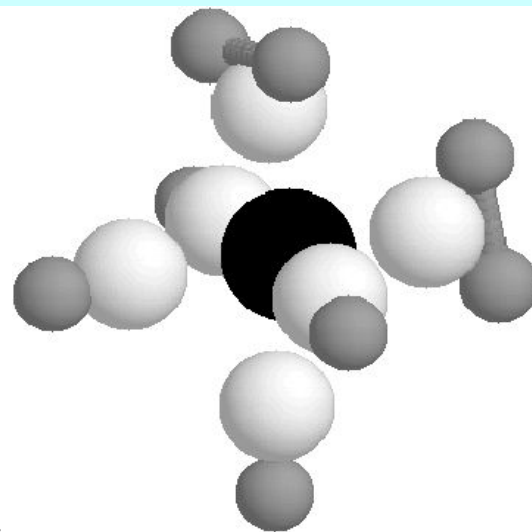
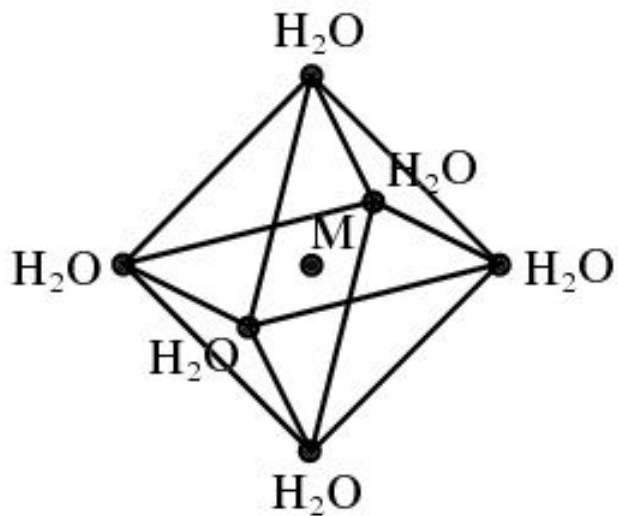
$$\frac{U_{pot}}{N} = \frac{2\pi N}{V} \int_0^{\infty} V_{ij}(r) g(r) r^2 dr$$

парний потенціал взаємодії

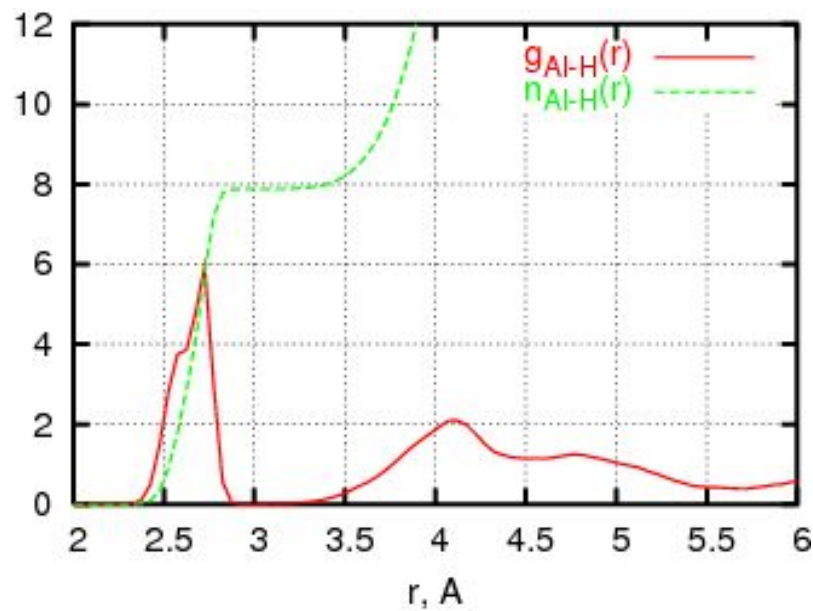
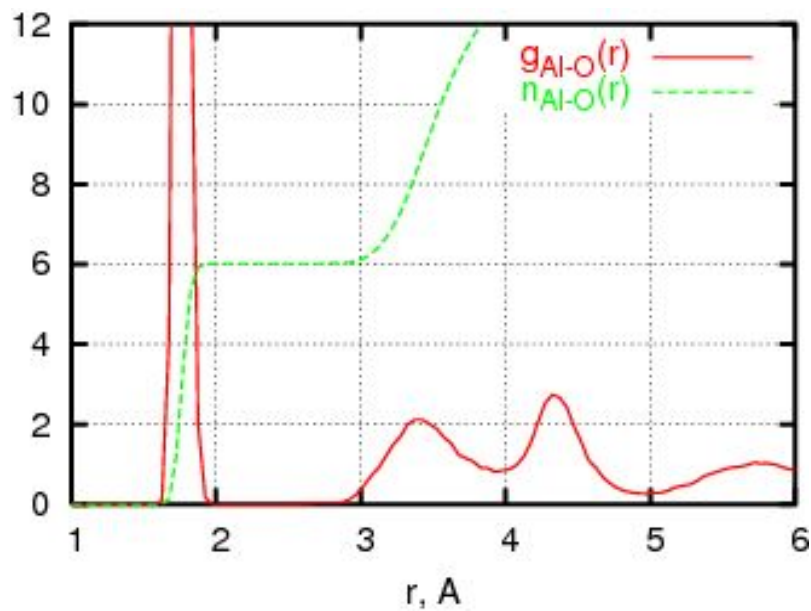
Тиск в системі з парними взаємодіями:

$$P = \frac{NT}{V} - \frac{2\pi N^2}{3V^2} \int_0^{\infty} \frac{dV_{ij}(r)}{dr} g(r) r^3 dr$$

Домішки в бінарних системах

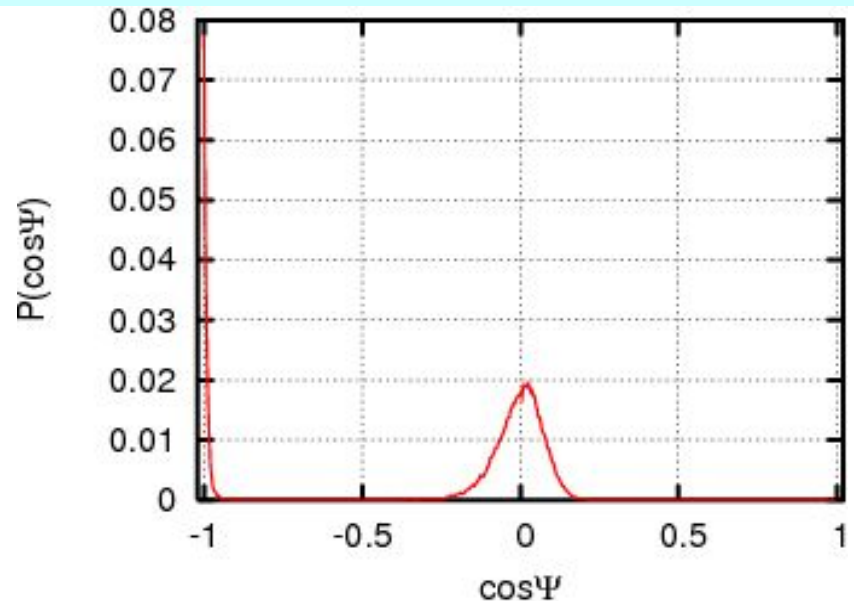
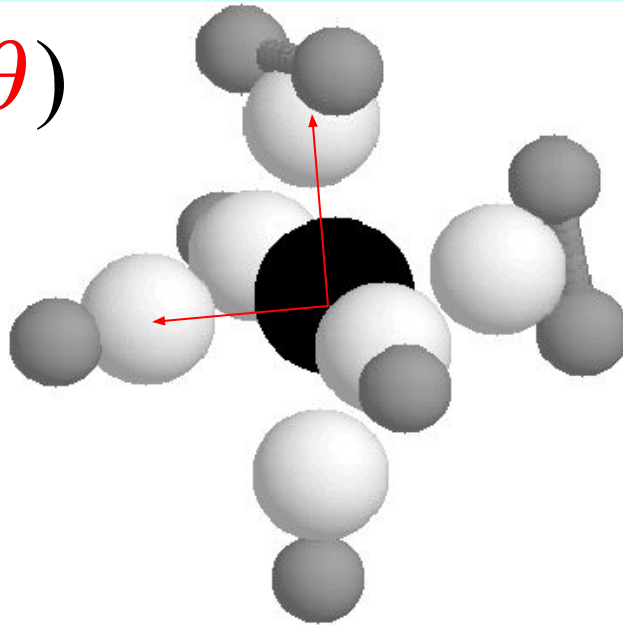


Іон Al^{3+} у воді



Кутові розподіли

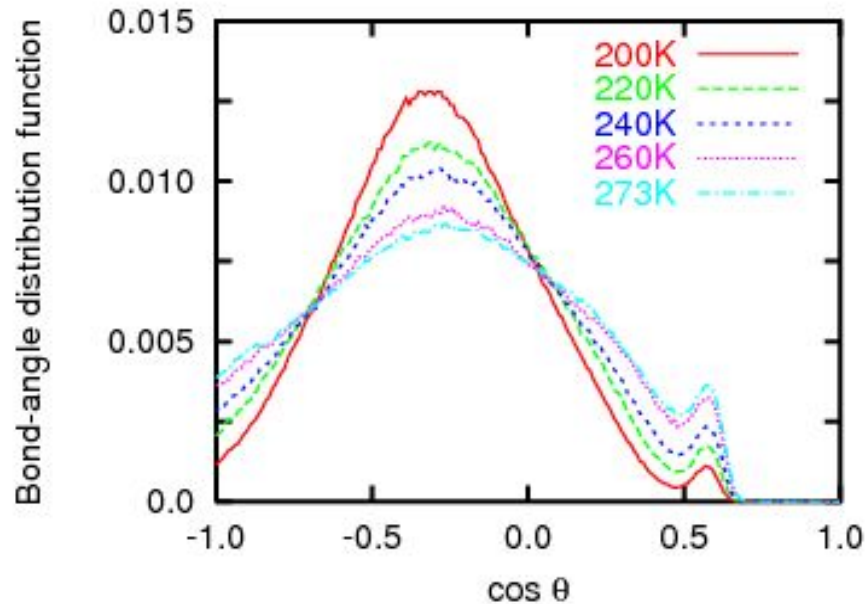
$$P(\cos \theta)$$



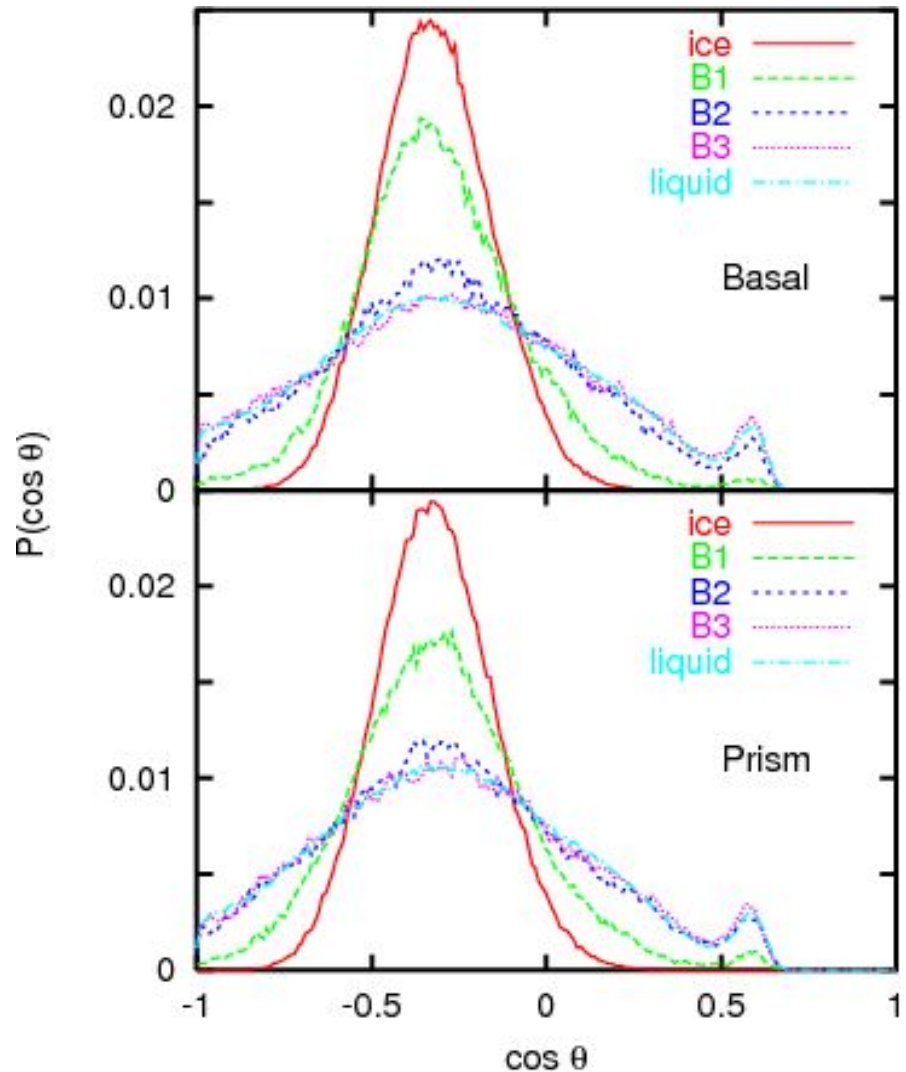
1. Робиться цикл по N частинках : $I=1,N$
2. Розраховуються відстані R_{ij} між I -ю та всіма іншими частинками, що попадають $R_{ij} < R_{\max}$
3. Враховуються періодичні граничні умови
4. Розраховуються кути між різними тріадами атомів
5. При попаданні кута θ_{ijk} у проміжок між θ і $\theta + \Delta\theta$ сума збільшується на 1
6. Кінцеву сумарну функцію від θ усереднити по N частинках

Кутові розподіли

Вода



Границя розділу лід-вода



Структурні фактори

Однокомпонентні системи:

$$S(k) = 1 + \frac{4\pi N}{V} \int_0^{\infty} (g(r) - 1) \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 dr$$

Основні властивості $S(k)$:

- а) при k прямуючому до 0 визначається ізотермічною стисливістю системи;
- б) різкий перший максимум приблизно при $k \sim 2\pi/R_{\text{maxRDF}}$;
- в) при великих хвильових числах прямує до 1.

Бінарні системи: (розрізняють три різні парціальні структурні фактори)

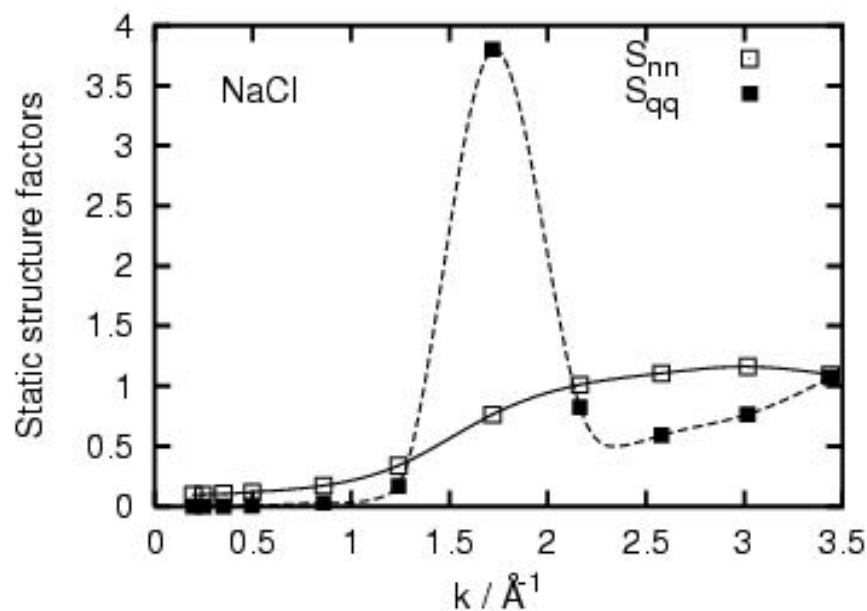
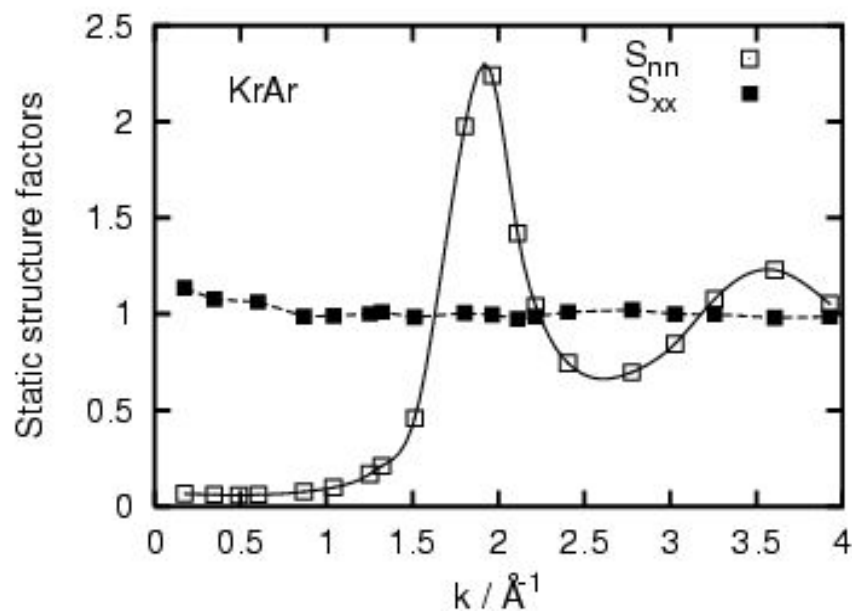
$$S_{ij}(k) = \delta_{ij} + \frac{4\pi (N_i N_j)^{\frac{1}{2}}}{V} \int_0^{\infty} (g_{ij}(r) - 1) \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 dr \quad i, j = A, B$$

Структурні фактори

В бінарних системах часто зручно оперувати лінійними комбінаціями парціальних структурних факторів:

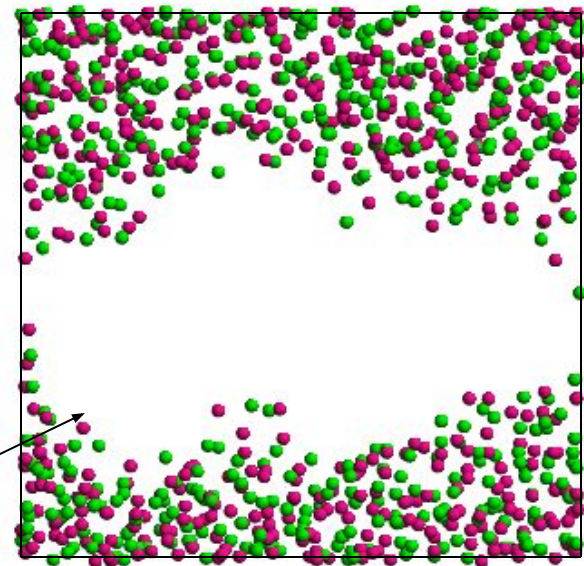
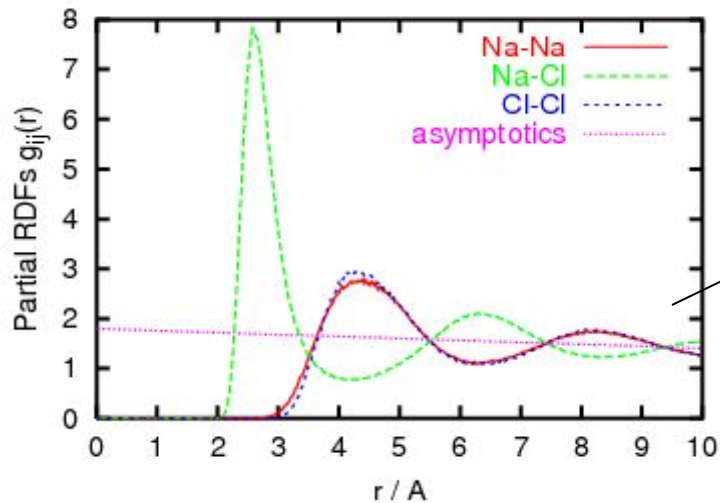
$$S_{NN}(k) = c_A S_{AA} + 2(c_A c_B)^{\frac{1}{2}} S_{AB} + c_B S_{BB} \quad \text{Повний структурний фактор}$$

$$S_{CC}(k) = c_B S_{AA} - 2(c_A c_B)^{\frac{1}{2}} S_{AB} + c_A S_{BB} \quad \text{Концентраційний структурний фактор}$$

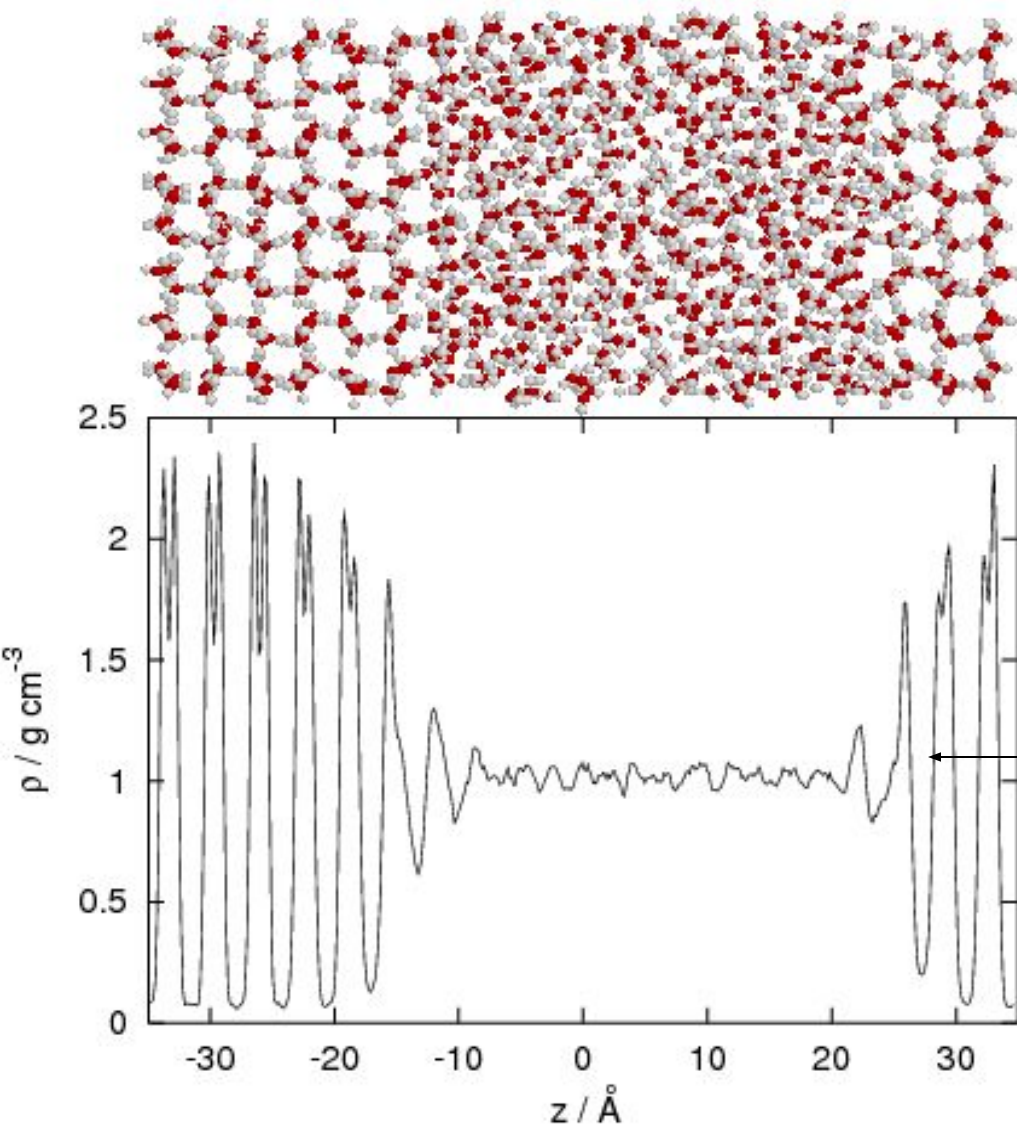


Неоднорідні системи

Традиційне використання
парних функцій розподілу як
для об'ємних систем не
оправдовує себе



Неоднорідні системи

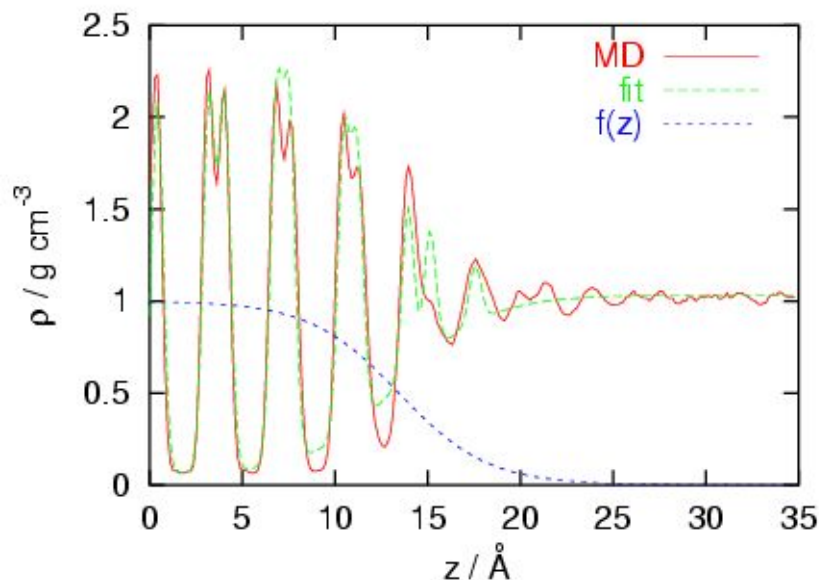


Профіль густини

$$L_x L_y \int_{-L_z/2}^{L_z/2} n_i(z) dz = N_i \quad i = A, B$$

Аналіз профілів густини

(2110) границя розділу лід/вода



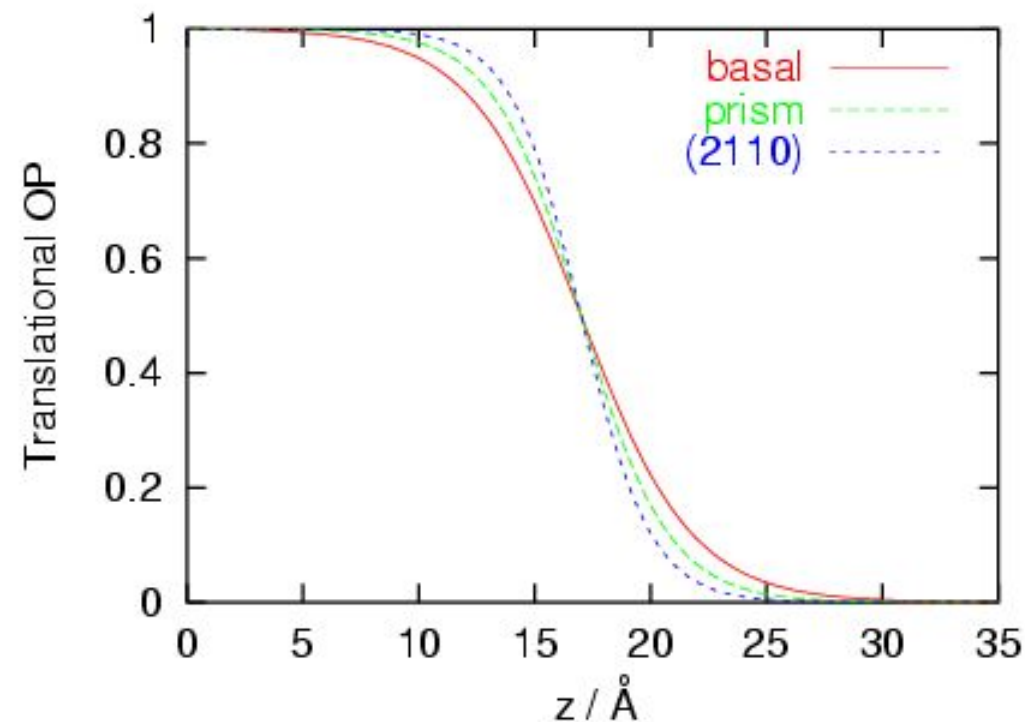
$$\rho(z)^{fit} = \rho_l [1 - f(z)] + \rho_s(z) f(z)$$

$$f(z) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{z - z_0}{w}\right) \right]$$

параметри
підгонки

Трансляційні параметри порядку

Протяжність границь розділу характеризується так-званою “10-90” шириною, яка характеризує відстань, на якій параметр порядку змінюється від 10 до 90 процентів величини.



interface	10-
Basal	1
prism	8
(2110)	6