

УДК 663.549

## ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТОВ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ (МЕТОДИЧЕСКАЯ РАЗРАБОТКА)

© И.И. Горелкин, А.А. Меньших

Gorelkin I.I., Menshikh A.A. A programme for computing molecular interactions. The article looks at the programme «VanDerVaals» that simulates molecular interactions of two particles driven in the given directions with the initial speeds being known. It is adapted for educational purposes.

Целесообразность использования компьютерной техники при изучении химических дисциплин в наше время, по-видимому, не нуждается в обосновании. Так, проведение лабораторных работ по исследованию процессов на атомно-молекулярном уровне в реальных системах либо требует очень дорогостоящего оборудования, либо вообще невозможно.

К сожалению, число компьютерных программ, специально разработанных для учебных занятий по химии, мало, или они труднодоступны. Поэтому нам представляется актуальной разработка учебных моделирующих программ для проведения лабораторных работ к таким курсам как «Строение вещества», «Физическая химия», «Квантовая химия».

В данной работе описана составленная нами программа, под условным названием «VanDerVaals», моделирующая межмолекулярное взаимодействие двух частиц, движущихся в заданных направлениях с известными начальными скоростями. При сближении на достаточно близкое расстояние между частицами возникают силы межмолекулярного взаимодействия, описываемые известным соотношением Леннарда – Джонса:

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

где  $U(r)$  – потенциальная энергия системы, зависящая от расстояния  $r$  между частицами,  $\sigma$  – равновесное расстояние, на котором силы притяжения и отталкивания равны между собой,  $\varepsilon$  – глубина потенциальной ямы,  $n$  и  $m$  – параметры, характеризующие соответственно притяжение и отталкивание (обычно принимают  $n = 6$ ,  $m = 12$ ).

Полная энергия движущихся частиц включает в себя, помимо потенциала Леннарда – Джонса, также кинетическую энергию  $K$ . В случае двух частиц их движение можно рассматривать в одной плоскости, и тогда каждый из слагаемых полной энергии зависит от четырех координат (в декартовой системе):  $(x_1, y_1)$  для первой частицы и  $(x_2, y_2)$  – для второй:

$$E = K(x_1, y_1, x_2, y_2) + U(x_1, y_1, x_2, y_2).$$

Таким образом, для описания системы из двух движущихся частиц достаточно системы из восьми дифференциальных уравнений (в частных производных)

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial p_{x_1}} &= \frac{p_{x_1}}{m_1}; & \frac{\partial E}{\partial p_{y_1}} &= \frac{p_{y_1}}{m_1}; \\ \frac{\partial E}{\partial p_{x_2}} &= \frac{p_{x_2}}{m_2}; & \frac{\partial E}{\partial p_{y_2}} &= \frac{p_{y_2}}{m_2}; \\ \frac{\partial E}{\partial x_1} &= \frac{\partial U}{\partial x_1}; & \frac{\partial E}{\partial y_1} &= \frac{\partial U}{\partial y_1}; \\ \frac{\partial E}{\partial x_2} &= \frac{\partial U}{\partial x_2}; & \frac{\partial E}{\partial y_2} &= \frac{\partial U}{\partial y_2}. \end{aligned} \quad (1)$$

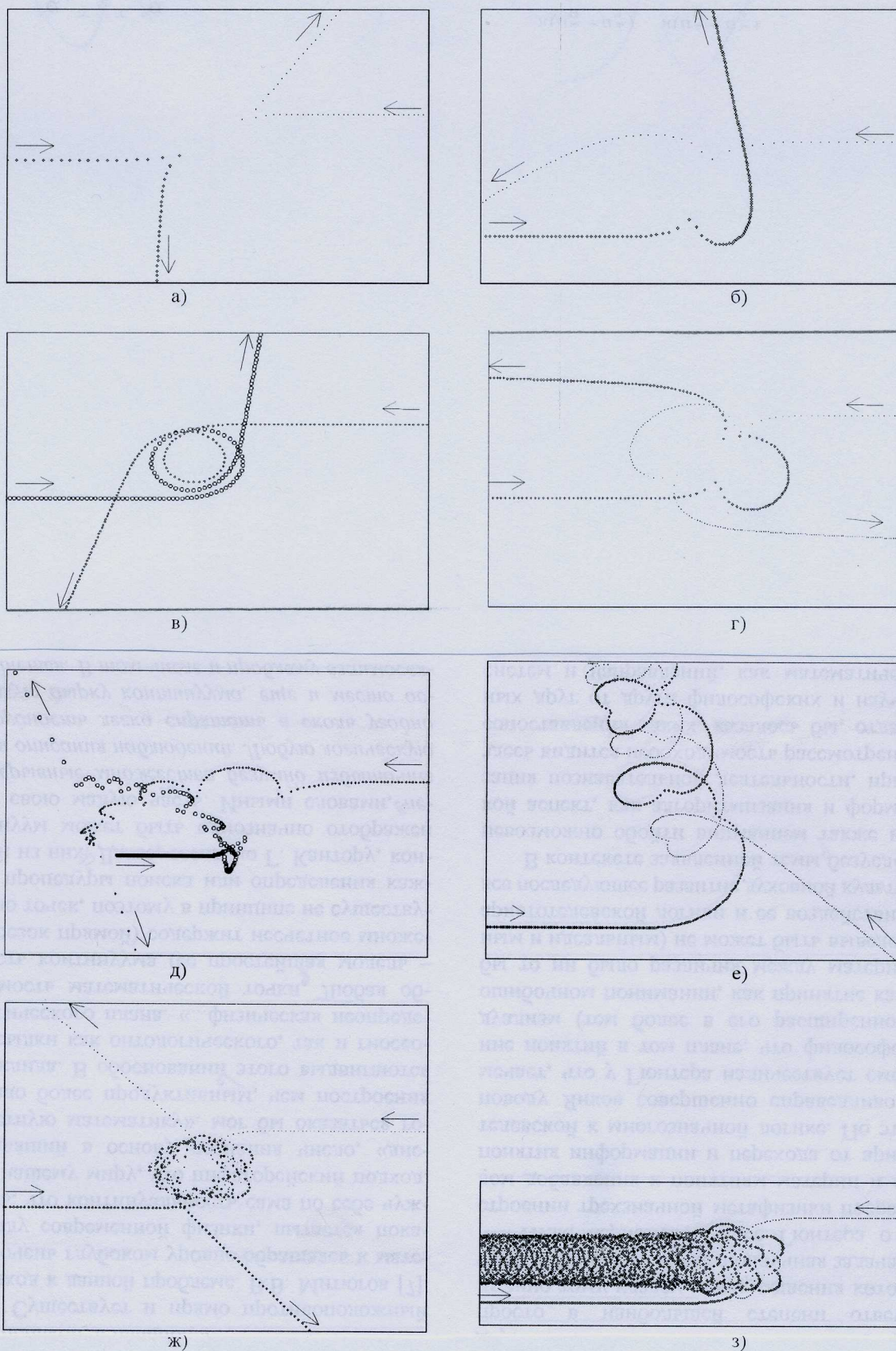
Для решения системы (1) мы использовали широко известный метод Рунге – Кутты, дающий быструю сходимость при небольшом числе итераций (ошибка  $\sim$  шаг<sup>4</sup>). За критерий окончания итерации при расчете текущего значения каждого параметра  $M_i$  взято условие

$$\frac{|M_i| - |M_{i-1}|}{|M_i|} < 0,01.$$

При отладке программы мы использовали литературные данные для величин  $\sigma$  и  $\varepsilon$ , приведенные в таблице 1.

При использовании программы возможна предварительная установка следующих параметров:  $M$ ,  $\sigma$ ,  $\varepsilon$ , начальные координаты двух частиц (по умолчанию  $x_1 = y_1 = 0$ ,  $x_2 = 30 \cdot 10^{-10}$  м,  $y_2 = 6 \cdot 10^{-10}$  м), начальные скорости (м/с), интервал и шаг итерации, видимый размер частицы ( $r \cdot 10^{-10}$  м), задержка (скорость отображения на дисплее).

При запуске программы отображается траектория движения частиц, а также может быть получено значение их скоростей в заданный момент времени.



**Рис. 1.** Траектории движения одинаковых молекул при соударении. Плотность точек на траектории пропорциональна скорости. Траектория одной из молекул обозначена точками большего размера. а), в), д), ж), з) – молекулы водорода, б), г) и е) – молекулы кислорода. Начальные скорости: а) 703 и 398 м/с, б) 349 и 686 м/с, в) 2645 и 2645 м/с, г) 406,5 и 504,1 м/с, д) 50,5 и 711,4 м/с, е) 832 и 1013 м/с, ж) 1018 и 1239 м/с, з) 1042 и 1154 м/с

Таблица 1

Кинетические параметры молекул некоторых газов

Вещество	$M$ , г/моль	$\sigma \cdot 10^{10}$ , м	$\epsilon \cdot 10^{23}$ , Дж	Вещество	$M$ , г/моль	$\sigma \cdot 10^{10}$ , м	$\epsilon \cdot 10^{23}$ , Дж
H <sub>2</sub>	2,02	2,97	51,1	He	4,00	2,70	14,1
O <sub>2</sub>	32,00	3,43	162	Ne	20,17	2,80	49,2
N <sub>2</sub>	28,01	3,68	131	Ar	39,94	3,42	165
CO	28,01	3,59	138	Kr	83,80	3,60	236
CH <sub>4</sub>	16,04	3,82	205	Xe	131,3	4,10	305

Как показывает данная модель (рис. 1), в зависимости от соотношения начальных импульсов и минимального расстояния сближения, ван-дер-ваальсовое взаимодействие между частицами может иметь самый разнообразный характер. При близко расположенных траекториях сближения происходит «лобовой удар» (рис. 1а), приводящий к изменению направления движения на противоположное. При большем минимальном расстоянии сближения частицы могут двигаться по более сложным траекториям (рис. 1б–д), вплоть до объединения в общий комплекс (молекулы Ван-дер-Ваальса, рис. 1е, з). При более детальной прорисовке момента образования молекулярного комплекса, что достигается уменьшением шага итерации, хорошо видно, как происходит колебание комплекса, совмещенное с его вращательным и поступательным движением (рис. 1з). При некотором соотношении импульсов молекулярный комплекс существует незначительное время и затем самопроизвольно распадается (рис. 1ж) без участия третьей частицы.

Помимо точного моделирования молекулярных систем в той мере, которая определяется заложенными физическими параметрами, программа «VanDerVaals» может в учебных целях использоваться и для моделирования неких условных систем. Так, взяв в качестве  $\sigma$  и  $\epsilon$  некоторые усредненные значения (например,  $\sigma = 3\text{ \AA}$ ,  $\epsilon = 100 \cdot 10^{-23}$  Дж), и, задавая различные массы частиц, можно исследовать взаимодействие тяжелых и легких молекул друг с другом в зависимости от соотношения их скоростей (включая неподвижное состояние одной из частиц), изменяя  $\sigma$  – исследовать влияние размеров молекул на характер столкновений, изменяя  $\epsilon$  – влияние прочности межмолекулярных связей и т. д.

Программа «VanDerVaals» при небольшом изменении, включающем замену потенциала Леннарда – Джонса на кулоновский потенциал, может быть адаптирована для моделирования опытов Резерфорда по рассеянию  $\alpha$ -частиц и взаимодействия между заряженными ионами.

С помощью программы «VanDerVaals» можно организовать несколько лабораторных работ, примерное содержание которых может быть следующим.

**Работа 1.** Преподаватель задает набор исходных координат и скорость одной из молекул.

Задание: для каждой пары значений  $u_1$  и  $u_2$  подобрать такое соотношение скоростей  $V_2/V_1$ , при котором вектор  $V_2$  в результате столкновения повернется на  $90^\circ$ . Как соотношение  $V_2/V_1$  зависит от разности  $u_2 - u_1$  (построить графическую зависимость и объяснить ее)?

**Работа 2.** Преподаватель дает набор величин  $V_2$  и  $V_1$ .

Задание: для каждой пары значений  $V_2$  и  $V_1$  найти минимальное расстояние, на котором становится заметным взаимодействие (изменение траектории). Построить графическую зависимость между  $(u_2 - u_1)_{\min}$  и  $(V_2 + V_1)$  и объяснить ее.

**Работа 3.** Преподаватель дает характеристики молекул:  $M$ ,  $\epsilon$ ,  $\sigma$ .

Задание: подобрать соотношение  $V_2/V_1$ , при котором начинается образование молекул Ван-дер-Ваальса. Измерив скорость, рассчитать энергию поступательного, вращательного и колебательного движений. Определить интервал  $V_2/V_1$  при одном из фиксированных значений  $V_1$  (или  $V_2$ ). Как ширина этого интервала зависит от начальных импульсов (построить график)?

**Работа 4.** Преподаватель задает координаты  $x_1$  и  $y_1$  и компоненты вектора скорости  $V_{x_1}$  и  $V_{y_1}$  одной молекулы и координаты второй молекулы.

Задание: опытным путем найти компоненты вектора скорости второй молекулы  $V_{x_2}$  и  $V_{y_2}$ , при которых происходит наиболее сильное ван-дер-ваальсовое взаимодействие (таких наборов компонентов может быть несколько). По измеренным характеристикам движения комплекса найти его энергетические параметры.

Поступила в редакцию 5 февраля 2002 г.