Задача 10-2 Потенциал Леннард-Джонса.

Часть 1. Две молекулы

1.1 Сделав замену $x = \left(\frac{\alpha}{r}\right)^6$, получим квадратичную зависимость:

$$y(x) = x^2 - x - E_0 / 4\varepsilon \quad (1)$$

Минимальное значение достигается при:

$$x_{min} = 1/2 \quad (2),$$

т. е. при:

$$r = \alpha\sqrt[6]{2} \quad (3)$$

и равно:

$$E_{min} = -\varepsilon \quad (4).$$

Энергия взаимодействия равна нулю при:

$$r = \alpha \quad (5).$$

1.2 График зависимости $E(r)$ представлен на рис. 1.

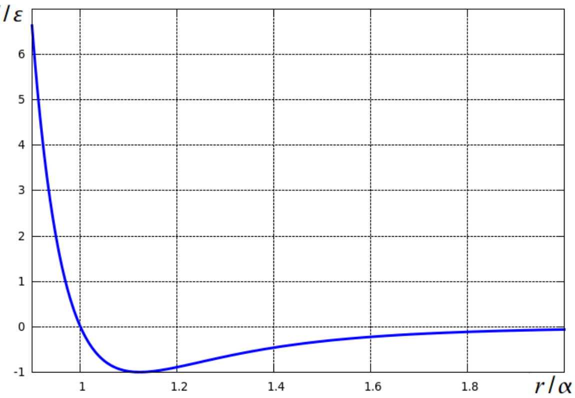

Рис. 1. График зависимости $E(r)$

Часть 2. Структура жидкости

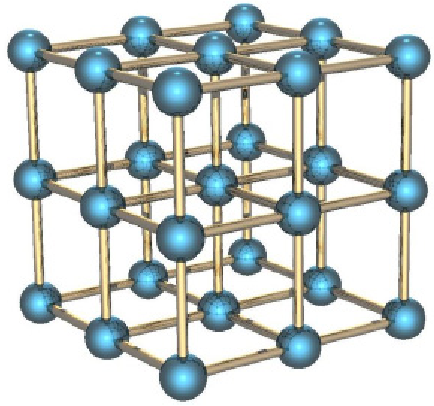

Рис. 2. Кубическая решетка

2.1 Кубическая решетка изображена на рис. 2. Молекула, находящаяся внутри жидкости, имеет 6 «близких соседей», 12 «средних» и 8 «дальних». Всего 26 штук.

2.2 Молекула, находящаяся на поверхности жидкости, имеет 5 «близких соседей», 8 «средних» и 4 «дальних».

2.3 Потенциальная энергия взаимодействия молекулы со всеми соседями равна:

$$E_{BH} = 6 \cdot 4\varepsilon\left(\left(\frac{\alpha}{a}\right)^{12} - \left(\frac{\alpha}{a}\right)^6\right) + 12 \cdot 4\varepsilon\left(\left(\frac{\alpha}{a\sqrt{(2)}}\right)^{12} - \left(\frac{\alpha}{a\sqrt{(2)}}\right)^6\right) + 8 \cdot 4\varepsilon\left(\left(\frac{\alpha}{a\sqrt{(3)}}\right)^{12} - \left(\frac{\alpha}{a\sqrt{(3)}}\right)^6\right) \quad (6).$$

Сделав замену $x = \left(\frac{\alpha}{a}\right)^6$ и приведя подобные слагаемые, получим:

$$y(x) = 6{,}2x^2 - 7{,}8x - E_{BH} / 4\varepsilon \quad (7)$$

Минимальное значение энергии реализуется при:

$$x_{min} = 0{,}629 \quad (8),$$

т. е. при:

$$a = \frac{\alpha}{\sqrt[6]{0{,}63}} \quad (9).$$

Минимальное значение энергии равно:

$$E_{BH} = -9{,}81\varepsilon \quad (10).$$

Часть 3. Свойства жидкости

3.1 В объеме V жидкости находится $N = V / a^3$ штук молекул. Их масса равна $m = \frac{N}{N_A} M$. Тогда плотность равна:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{M}{a^3 N_A} = \frac{M\sqrt{0,629}}{\alpha^3 N_A} \qquad (11).$$

3.2 Молекула должна получить энергию равную (по модулю) энергии взаимодействия со своими «соседями» на поверхности жидкости (п. 2.2):

$$E_{ПОВ} = 5 \cdot 4\varepsilon\left(x^2 - x\right) + 8 \cdot 4\varepsilon\left(\frac{x^2}{64} - \frac{x}{8}\right) + 4 \cdot 4\varepsilon\left(\frac{x^2}{729} - \frac{x}{27}\right) = 4\varepsilon\left(5,1x^2 - 6.1x\right) = -7,35\varepsilon \qquad (12)$$

При испарении массы m необходимо разорвать $\frac{m}{M} N_A$ связей, т.е:

$$Lm = \frac{m}{M} N_A \left|E_{ПОВ}\right| \qquad (13),$$

откуда:

$$L = 7,35\varepsilon \frac{N_A}{M} \qquad (14).$$

3.3 Для выхода молекулы на поверхность ей необходимо сообщить энергию равную:

$$E_{ВН-ПОВ} = \left|E_{ВН} - E_{ПОВ}\right| = 2,46\varepsilon \qquad (15).$$

При образовании поверхности с площадью S, на нее выходит S / a^2 молекул, тогда:

$$\sigma S = \frac{S}{a^2} E_{ВН-ПОВ} \qquad (16),$$

откуда

$$\sigma = \frac{2,46\varepsilon\sqrt[3]{0,629}}{\alpha^2} \qquad (17).$$

Часть 4. Вычислительная

4.1 Численные значения плотности, удельной теплоты парообразования и коэффициента поверхностного натяжения:

$$\rho = 728 кг / м^3 \qquad (18),$$

$$L = 199 кДж / кг \qquad (19),$$

$$\sigma = 0,0194 Н / м \qquad (20).$$

Табличные значения равны:

$$\rho = 800 кг / м^3 \qquad (21),$$

$$L = 200 кДж / кг \qquad (22),$$

$$\sigma = 0,011 Н / м \qquad (23).$$

Очень даже неплохо!