

## ĐỘNG LỰC HỌC CỦA HỆ NHIỀU HẠT DYNAMICS OF MANY PARTICLE SYSTEMS

ThS. NGUYỄN THẾ HƯNG  
Bộ môn Vật lý, Trường ĐHHH

### Tóm tắt:

Bài báo này giới thiệu một phương pháp mới trong nghiên cứu các hệ vật lý đó là mô phỏng bằng máy tính. Nhờ đó chúng ta hoàn toàn có thể nắm được các qui luật biến đổi nội tại của hệ thông qua mô phỏng các thông số trạng thái như: nhiệt độ, áp suất, năng lượng... mà lý thuyết gặp những hạn chế khi nghiên cứu các hệ thực.

### Abstract:

So far, we have studied the dynamical behavior of systems with only a few particles. However many systems in nature such as gases, liquids and solids contain many mutually interacting particles ( $10^{23} - 10^{25}$  molecules). The most direct approach is to meet this challenge head-on by a computer simulation of the many particle problem itself. We might imagine solving on some future supercomputer the microscopic equations of motion for  $10^{25}$  mutually interacting particles. Indeed this approach, known as the **molecular dynamics** method, has been applied to "small" many particle systems of typically several hundred to several thousand particles and has yielded much insight into the observable behavior of gases, liquids, and solids.

### 1. Mục đích

Chúng ta đã nghiên cứu các tính chất động lực học của hệ chỉ với một số ít hạt. Tuy nhiên, trong tự nhiên lại gặp các hệ nhiều hạt chẳng hạn như các chất khí, lỏng và rắn gồm một số lượng lớn các hạt tương tác lẫn nhau. Chẳng hạn như: hai tách cà phê được đặt trong cùng một điều kiện như nhau, mỗi tách bao gồm  $10^{23} - 10^{25}$  phân tử chuyển động gần đúng theo các định luật vật lý cổ điển. Mặc dù lực tương tác giữa các phân tử làm cho quỹ đạo của mỗi phân tử rất phức tạp nhưng các đặc tính của cà phê trong mỗi tách là giống nhau. Ví dụ, chúng ta đều biết nhiệt độ trong mỗi tách cà phê sẽ đạt tới nhiệt độ phòng và không còn thay đổi theo thời gian nữa. Nhiệt độ đó thì liên quan gì tới quỹ đạo của các phân tử riêng biệt? Vì sao nhiệt độ của cà phê không phụ thuộc vào thời gian trong khi quỹ đạo của các phân tử lại thay đổi liên tục.

Thí dụ về tách cà phê trên cho thấy một điều là: bằng cách nào ta có thể thấy được các tính chất phức tạp của hệ nhiều hạt do tương tác giữa các phân tử? Cách trực quan nhất là mô phỏng chúng trên máy tính. Với số lượng phương trình chuyển động ví mô cỡ  $10^{25}$  có lẽ phải cần đến siêu máy tính nhưng ở đây chúng ta sẽ dùng một phương pháp có tên là "phương pháp động lực học phân tử" áp dụng cho các hệ nhiều hạt "nhỏ" khoảng từ vài trăm đến vài nghìn hạt kết hợp với các điều kiện biên thích hợp cũng đã cho thấy những biểu hiện khá phù hợp với các mô hình của các chất khí, lỏng và rắn.

Đối với một hệ nhiều hạt như vậy thì các đặc trưng cơ bản của nó là gì? Những tham số nào cần thiết để mô tả nó? Điều này đã được làm rõ trong cơ học thống kê, ở đây ta sẽ mô phỏng hệ thông qua lời giải số của các định luật Newton.

### 2. Thế tương tác giữa các phân tử

Trước tiên ta xây dựng mô hình của hệ để mô phỏng. Để hiểu được các tính chất định tính của hệ nhiều hạt ta chỉ xét trong giới hạn cổ điển, trong đó các phân tử là hình cầu và trượt trên mặt hoá học. Giả thiết lực tương tác giữa các phân tử chỉ phụ thuộc vào khoảng cách giữa chúng, trong trường hợp này thế năng tổng cộng  $U$  là tổng của các tương tác hai hạt.

$$U = V(r_{12}) + V(r_{13}) + \dots + V(r_{1N}) + \dots = \sum_{i < j=1}^N V(r_{ij}) \quad (1)$$

trong đó  $V(r_{ij})$  chỉ phụ thuộc vào độ lớn khoảng cách  $r_{ij}$  giữa các hạt  $i$  và  $j$ . Dạng thế trên phù hợp với các chất lỏng đơn giản chẳng hạn như Ar lỏng.

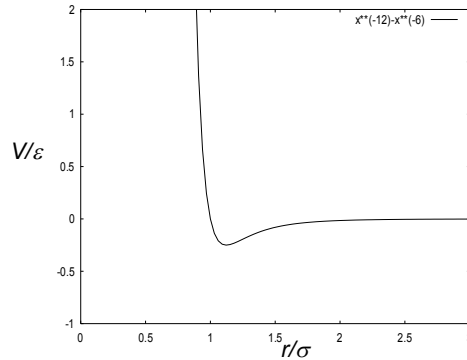
Dạng của thế  $V(r)$  thường được chọn đơn giản. Đặc điểm quan trọng nhất của thế  $V(r)$

cho chất lỏng là lực đẩy mạnh khi  $r$  nhỏ và lực hút yếu khi khoảng cách lớn. Lực hút yếu đóng vai trò quan trọng khi  $r$  lớn là do lực tác dụng tương hỗ giữa các nguyên tử, lực hút này gọi là lực Vander Waal's.

Một dạng hiện tượng luận của thế  $V(r)$  là thế Lennard – Jones:

$$V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \text{ Sự phụ thuộc } r^6 \text{ để}$$

phù hợp với lý thuyết, còn sự phụ thuộc  $r^{12}$  chỉ được lựa chọn để thuận tiện. Thế Lennard – Jones có hai tham số là “độ dài”  $\sigma$  và “năng lượng”  $\varepsilon$ , trong đó tại  $r = \sigma$ ,  $V(r) = 0$ . Tham số  $\varepsilon$  là độ sâu của thế tại cực tiểu của  $V(r)$ , trong đó cực tiểu xuất hiện ở khoảng cách  $r = 2^{1/6} \varepsilon$ . Chú ý đây là thế tương tác gần và  $V(r)$  đủ nhỏ khi  $r > 2,5\sigma$ .



**Hình 1: Hình vẽ thế Lennard – Jones,  $r$  theo đơn vị  $\sigma$  và  $V(r)$  theo đơn vị  $\varepsilon$ .**

Để thuận tiện ta sử dụng đơn vị của độ dài, năng lượng và khối lượng tương ứng là  $\sigma$ ,  $\varepsilon$  và  $m$ , với  $m$  là khối lượng của hạt. Đơn vị của vận tốc là  $(\varepsilon / m)^{1/2}$  và thời gian là  $\tau = (m\sigma^2 / \varepsilon)^{1/2}$ . Các

tham số  $\sigma$ ,  $\varepsilon$  và  $m$  của thế Lennard – Jones cho Ar lỏng là:  $\varepsilon / k_B = 119,8K$  và  $\sigma = 3,405A^0$ . Khối lượng của nguyên tử Ar là  $6,69 \cdot 10^{-23} mg$  và  $\tau = 1,82 \cdot 10^{-12} s$ .

### 3. Thuật toán

Xét mô hình hệ nhiều hạt, ta cần đưa ra phương pháp tích phân số để tính quỹ đạo của từng hạt. Bằng việc mô phỏng các phương trình chuyển động của Newton, ta có thể kiểm tra tính ổn định của nghiệm số thông qua việc xem xét năng lượng tổng cộng hệ, đảm bảo năng lượng này không lệch khỏi giá trị ban đầu. Có thể tính tọa độ và vận tốc của các hạt như sau:

Giả sử ở thời điểm  $t$  hạt có: tọa độ  $x_n$ , vận tốc  $v_n$ , gia tốc của hạt  $a_n = F_n / m$ , lực  $F_n = -\partial V(x_n) / \partial x_n$ ,  $V(x_n)$  là thế Lennard – Jones ứng với tọa độ  $x_n$ . Năng lượng của hạt là:

$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 + V(x_n)$ . Tại thời điểm  $t + \Delta t$ : tọa độ  $x_{n+1}$ , vận tốc  $v_{n+1}$  của hạt được tính theo công thức liên hệ sau:

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + 0,5 a_n \Delta t^2 \quad (2)$$

$$v_{n+1} = v_n + 0,5(a_{n+1} + a_n) \Delta t \quad (3)$$

với gia tốc  $a_{n+1}$  tương tự được xác định từ  $x_{n+1}$ . Do đó năng lượng hạt tại thời điểm này là:

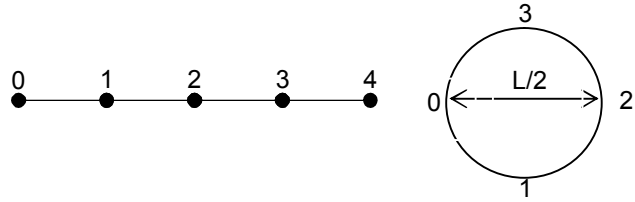
$$E_n = \frac{1}{2}mv_{n+1}^2 + V(x_{n+1}) \quad (4)$$

Như vậy khi cho hệ tiến triển theo thời gian, nếu biết các tham số vĩ mô (tọa độ, vận tốc, gia tốc, động năng, thế năng, năng lượng, áp suất, nhiệt độ...) của hạt ở một thời điểm nào đó thì các tham số đó của hạt tại thời điểm tiếp theo cũng được xác định. Do đó ta hoàn toàn mô phỏng được sự thay đổi các tham số hệ nhiều hạt theo thời gian, nếu cấu hình ban đầu của hệ được chọn ngẫu nhiên thì kết quả sẽ rất gần với các hệ nhiệt động trong thực tế. Thuật toán trên được gọi là thuật toán Verlet áp dụng cho một thành phần chuyển động của hạt.

### 4. Các điều kiện biên

Việc mô phỏng càng hợp lý nếu ta kết hợp tất cả các đặc trưng liên quan đến hệ vật lí. Hệ thực ở đây chứa khoảng  $10^{23} - 10^{25}$  hạt. Xét một quả bóng nước hình cầu, tỉ lệ các phân tử nước ở gần thành tỉ lệ với tỉ số diện tích và thể tích  $(4\pi R^2) / (4\pi R^3 / 3)$ .

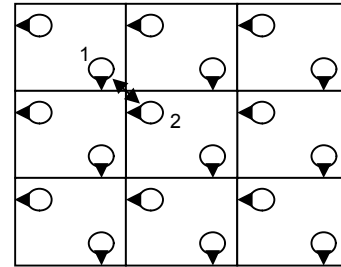
Vì  $N = \rho(4\pi R^3 / 3)$ , ở đây  $\rho$  là mật độ hạt, số hạt ở gần thành tỉ lệ với  $N^{2/3} / N = N^{-1/3}$ . Do đó số hạt trong mô phỏng động lực học phân tử cỡ  $10^2 - 10^4$  trong khi số hạt ở gần thành là không nhỏ. Do đó ta không thể mô tả một hệ vĩ mô bằng cách đặt các hạt vào bình với thành rắn.



Hình 2. Hai hạt tại  $x = 0$  và  $x = 3$  trên đường thẳng chiều dài  $L = 4$ ; khoảng cách giữa chúng là 3. Đường thẳng tạo thành đường tròn thì khoảng cách là 1

Một cách để làm giảm tối đa hiệu ứng bề mặt và mô phỏng tốt nhất các tính chất của hệ vĩ mô là sử dụng các điều kiện biên tuần hoàn.

Xét “hộp” một chiều (1D) N hạt, các hạt này chỉ chuyển động trên một đoạn thẳng có độ dài L. Điểm cuối của đoạn là thành, để sử dụng điều kiện tuần hoàn ta uốn cong đoạn thẳng này thành một đường tròn, điểm cuối trùng với điểm đầu và khoảng cách cực đại giữa các hạt là  $L/2$ .



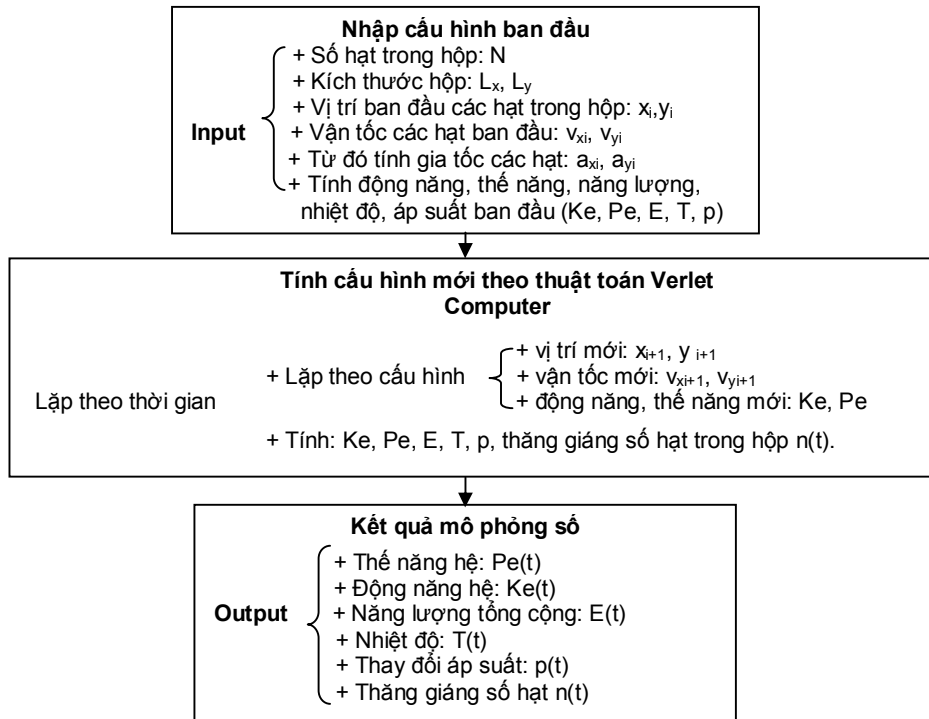
Hình 3. Ví dụ về điều kiện biên tuần hoàn trong trường hợp 2 chiều (2D).

Trường hợp hai chiều (2D), ta tưởng tượng một hộp với các đỉnh đối diện nối vào nhau do đó chiếc hộp có hình xuyên. Vì vậy, nếu các hạt chuyển động đi ra qua bề mặt hộp thì lại đi vào ở mặt đối diện. Khoảng cách cực đại giữa các hạt theo hướng x và y là  $L/2$ .

Giả thiết hạt 1 và 2 nằm ở ô trung tâm. Ô này được bao quanh bởi các ô giống hệt nó, với các vị trí của các hạt cũng giống hệt như vậy (ảnh của hạt). Khi các hạt này đi vào hoặc đi ra ô trung tâm thì ảnh của hạt cũng đi ra hoặc đi vào ô trung tâm qua mặt đối diện. Việc sử dụng điều kiện giới hạn ngụ ý tất cả các điểm là tương đương nhau.

### 5. Chương trình động lực học phân tử

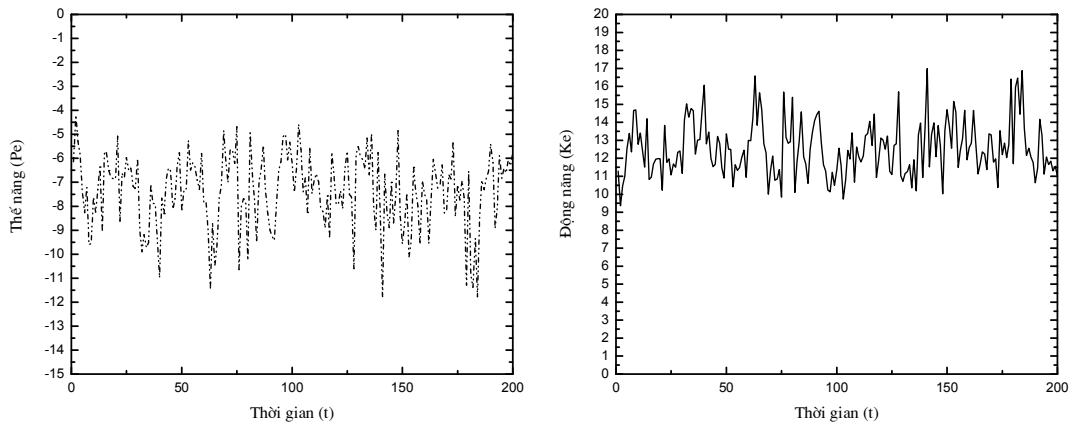
a. Sơ đồ cấu trúc chương trình



b. Chương trình động lực học phân tử được xét cho hệ hai chiều (2D) vì trường hợp này dễ mô phỏng và các kết quả nhận được khá tốt. Ngôn ngữ Fortran sẽ được sử dụng.

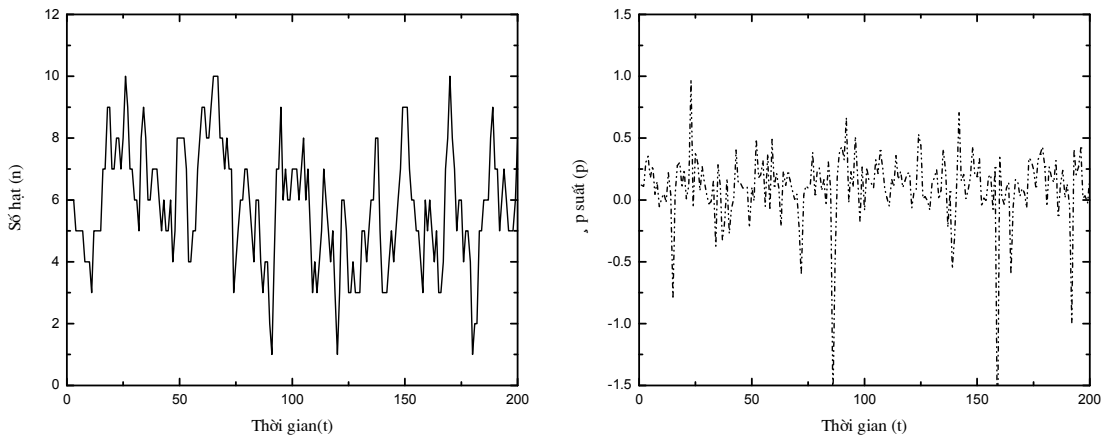
### 6. Kết quả mô phỏng

Chúng ta mô phỏng hệ nhỏ gồm  $N = 12$  hạt bị giam trong hộp 2 chiều vuông  $L_x = L_y = 8$ . Ban đầu các hạt ở nửa bên trái hộp và nằm tại góc hộp. Các hạt chuyển động với vận tốc ngẫu nhiên  $v_{max} = 1$  và tương tác với nhau bằng thế Lennard – Jones. Động năng, thế năng ban đầu: 5, -2 (đvnl). Bước lặp thời gian  $\Delta t = 0.02$  (s). Lặp theo cấu hình  $nsnap = 50$  (lần) để hệ về trạng thái cân bằng, sau đó cho hệ tiến triển theo thời gian  $n timer = 200$  (lần) để quan sát các biểu hiện của hệ thông qua các tham số: động năng, thế năng, nhiệt độ, áp suất và thay đổi số hạt nửa trái hộp.



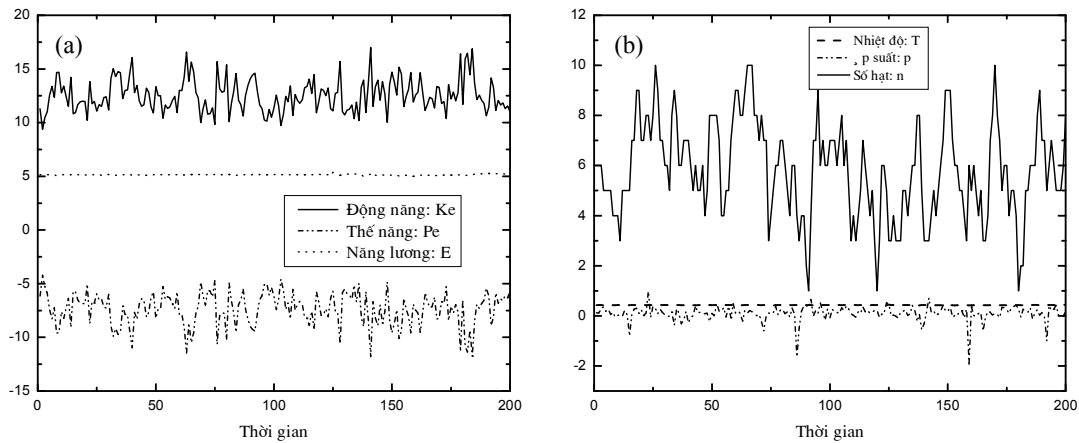
**Hình 4: Đồ thị sự phụ thuộc động năng và thế năng của hệ theo thời gian**

Sự thay đổi của động năng, thế năng theo thời gian khi hệ cân bằng được thấy trên Hình 4. Ta thấy có sự biến đổi qua lại giữa động năng và thế năng, tại cùng một thời điểm nếu động năng tăng thì thế năng giảm và ngược lại. Nhưng năng lượng tổng cộng vẫn đảm bảo không đổi (bảo toàn). Hình 6.a minh họa năng lượng tổng cộng là một đường thẳng theo thời gian. Khi hệ cân bằng thì nhiệt độ của hệ nhiệt động cũng là hằng số - Hình 6.b



**Hình 5: Đồ thị biểu diễn thẳng giá số hạt và áp suất của hệ vào thời gian**

Hình 5: biểu diễn sự thăng giáng của số hạt trong nửa hộp bên trái theo thời gian, số hạt này thăng giáng quanh giá trị trung bình  $n = 6$ . Điều này hoàn toàn phù hợp với lý thuyết thống kê. Áp suất của hệ tỉ lệ với mật độ hạt trong hộp cũng thay đổi tương ứng.



**Hình 6: Sự phụ thuộc năng lượng tổng cộng vào thời gian (a). Thay đổi nhiệt độ, áp suất và thăng giáng số hạt trong hộp của hệ theo thời gian (b).**

#### Kết luận:

Như vậy, bằng phương pháp động lực học phân tử ta hoàn toàn có thể thấy được các đặc tính và biểu hiện quan trọng của một hệ ví mô cỡ  $10^{25}$  phân tử chỉ bằng việc mô phỏng lại các tham số đặc trưng của một hệ nhỏ (số lượng phân tử ít hơn) kết hợp với các điều kiện biên cần thiết. Triển vọng của công nghệ nano trong tương lai có lẽ sẽ giúp chúng ta áp dụng cho các hệ lớn hơn nhờ vào các máy tính lượng tử (*siêu máy tính*).

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO:

- [1] Đàm Trung Đồn - *Vật lí phân tử và Nhiệt học* - NXB Giáo dục 1994
- [2] Phạm Quý Tư - *Nhiệt động lực học* - NXB Đại học Quốc gia Hà Nội 1998
- [3] Vũ Thanh Khiết - *Vật lí Thống kê* - NXB Đại học Quốc gia Hà Nội 1997
- [4] B. J. Alder and T. E. Wain Wright, " Studies in Molecular Dynamics.I. General Method".*J. Chem. Phys.* **31**, 495 (1960).
- [5] Farid F. Abraham, " Computational statistical mechanics: methodology, application and supercomputing". *Adv. Phys.* **53**, 1 (1986).
- [6] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, Mc Graw - Hill (1965).

**Người phản biện: ThS. Nguyễn Ngọc Khải**