

## 流体熵相关性质的Monte Carlo模拟新方法

吴雄武; 时钧

南京化工学院化工系, 南京 210009

摘要:

提出了用于计算实际体系熵相关性质的Monte Carlo多级取样分子模拟方法. 应用这一方法, 对硬球流体的化学势及Helmholtz自由能进行了估算, 得到了满意的结果. 计算化学势时, 不存在通常试验粒子方法所遇到的高密度问题. 该方法特别适合规律性的系统研究, 较之普通模拟方法要有效得多. 模拟得到的硬球体系无限稀释组份的超额化学势与对比直径的关系, 在相变区域为一条双凹曲线; 无论是在相变区还是在单相区, Carnahan-Starling公式对这一关系的描述均有较大偏差.

关键词: Monte Carlo 分子模拟 硬球 化学势 Helmholtz自由能

收稿日期 1992-05-09 修回日期 1992-07-17 网络版发布日期 1993-12-15

通讯作者: 吴雄武 Email:

### 本刊中的类似文章

1. 宋默;丁恩勇;金杰;许丽华.混合高聚物分相过程标度、分形与Monte Carlo模拟[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 617-621
2. 郭向云;钟炳;彭少逸.N<sub>2</sub>O分解反应中复杂动力学行为的模拟[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 873-875
3. 郭向云. 钨团簇形成和增长机理的Monte Carlo研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 174-176
4. 曹达鹏;汪文川;沈志刚;陈建峰.超临界甲烷在纳米材料中最适吸附压力的确定 [J]. 物理化学学报, 2001,17(10): 940-943
5. 商志才;俞庆森;林瑞森.分子体积及表面积的Monte Carlo模拟计算[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1097-1100
6. 郭向云;钟炳;彭少逸.N<sub>2</sub>O分解反应的动力学—Monte Carlo模拟[J]. 物理化学学报, 1995,11(02): 180-184
7. 徐驰;李明;陈念贻.铝酸钠熔体Monte Carlo法计算机模拟研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 627-629
8. 张小岗;郭向云;钟炳;彭少逸.甲醇在超临界环己烷中形成簇团的Monte Carlo初探[J]. 物理化学学报, 1997,13(10): 898-903
9. 黄宏新;钟子宜;曹泽星.用变分Monte Carlo方法处理分子[J]. 物理化学学报, 1997,13(08): 706-711
10. 黄宏新.精确固定节面量子Monte Carlo差值法[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 632-636
11. 邵晓红;张现仁;汪文川.密度泛函与分子模拟计算介孔孔径分布比较[J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 538-542
12. 黄宏新.自优化剩余函数量子Monte Carlo方法[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 742-746
13. 黄建花;朱超英;罗孟波.表面活性剂与高分子链混合体系的模拟[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 690-695
14. 贾玉香;郭向云.超临界流体中CO和H<sub>2</sub>吸附过程的Monte Carlo模拟[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 306-309
15. 郭向云;钟炳;彭少逸.用化学动力学方法估算颗粒表面的分维[J]. 物理化学学报, 1997,13(01): 52-55
16. 任秀彬;李换英;郭向云.甲烷部分氧化反应过程中的振荡行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 197-200
17. 周健;汪文川.Gibbs系综Monte Carlo模拟甲烷的吸附平衡[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 723-727
18. 钟闻;丁辛;唐志廉.纤维集合体内液体浸润的统计力学模型[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 682-686
19. 张昱;金心宇;陈抗生.等离子体聚合成膜中的活性粒子模拟分析[J]. 物理化学学报, 2000,16(10): 892-898
20. 黄宏新;曾宪标.量子Monte Carlo处理激发态[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 681-688
21. 黄宏新;廉世勋;曹泽星.剩余函数量子Monte Carlo方法[J]. 物理化学学报, 1999,15(07): 599-605
22. 张小岗;李永旺;钟炳;彭少逸.一氧化碳、氢、甲醇和正乙烷体系的分子模拟[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1036-1040
23. 曹达鹏;汪文川.模拟吸附在狭缝微孔中的丙烷的微观结构[J]. 物理化学学报, 1999,15(07): 581-587

扩展功能

本文信息

PDF(1442KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ Monte Carlo

▶ 分子模拟

▶ 硬球

▶ 化学势

▶ Helmholtz自由能

本文作者相关文章

▶ 吴雄武

▶ 时钧

24. 金文正;汪文川.气体混合物各组分化学势的Monte Carlo模拟[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 253-257
  25. 杨振;徐志军;杨晓宁.基于密度泛函理论研究二元排斥Yukawa流体的表面结构性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1460-1465
  26. 李平, 谈宁馨, 饶含兵, 李泽荣, 陈宇综.基于支持向量机方法的HERG钾离子通道抑制剂分类模型[J]. 物理化学学报, 0,(0): 0-0
-