

基于Gay-Berne势能模型的粗粒化动力学模拟研究正丁醇的玻璃态相变

Glass Formation of n-Butanol: Coarse-grained Molecular Dynamics Simulations Using Gay-Berne Potential Model

摘要点击 66 全文点击 23 投稿时间: 2011-11-7 采用时间: 2012-1-4

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/25/02/177-185

中文关键词 [Gay-Berne势能](#) [粗粒化动力学模拟](#) [玻璃态相变](#)

英文关键词 [Gay-Berne potential](#) [Coarse-grainedmolecular dynamics simulations](#) [Glass formation](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
谢桂龙	北京化工大学有机无机复合材料国家重点实验室, 北京100029	
张永红	天津工业大学物理系, 天津300387	
黄世萍*	北京化工大学有机无机复合材料国家重点实验室, 北京100029	huangsp@mail.buct.edu.cn

中文摘要

通过基于Gay-Berne势能模型的粗粒化动力学模拟, 研究液态正丁醇体系的冷却过程. 采用密度泛函计算, 拟合出适合正丁醇体系的GB势能参数. 体系的密度、平均势能等性质随温度的降低(由290 K降至50 K, 间隔为10 K)发生特殊变化, 即体系发生玻璃态相变, 相变温度为 $T_g=120\pm 10$ K, 与实验值 110 ± 1 K符合很好.

英文摘要

Using coarse-grained molecular dynamics simulations based on Gay-Berne potential model, we have simulated the cooling process of liquid n-butanol. A new set of GB parameters are obtained by fitting the results of density functional theory calculations. The simulations are carried out in the range of 290-50 K with temperature decrements of 10 K. The cooling characteristics are determined on the basis of the variations of the density, the potential energy and orientational order parameter with temperature, whose slopes all show discontinuity. Both the radial distribution function curves and the second-rank orientational correlation function curves exhibit splitting in the second peak. Using the discontinuous change of these thermodynamic and structure properties, we obtain the glass transition at an estimate of temperature $T_g=120\pm 10$ K, which is in good agreement with experimental results 110 ± 1 K.

Copyright@2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计