

# Молекулярно-динамическое моделирование аргона вблизи критической точки и жидкого аргона.

Г.Г. Маленков

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН*

Проведено моделирование аргона вблизи критической точки. Для определения параметров леннард-джонсова потенциала, описывающего взаимодействие между атомами аргона, проводились пробные расчеты кристаллического и жидкого аргона при  $T=100$  К, и выбирались такие значения этих параметров, чтобы плотности этих фаз были близки к полученным экспериментально. При понижении температуры при постоянной плотности ниже критической происходит формирование капли жидкого аргона в окружении атомов газа. Эта капля имеет не сферическую, а цилиндрическую форму. При моделировании жидкого аргона (температура 110 К, плотность  $1,513$  г/см<sup>3</sup>). Были рассчитаны значения объемов многогранников Вороного вокруг атомов аргона и было построено их распределение. Значения этих объемов лежат в пределах  $34 - 55$  А<sup>3</sup> (среднее значение  $43,6$  А<sup>3</sup>). Изучена неоднородность аргона по плотности.