

แบบจำลองพลศาสตร์โมเลกุลสำหรับการสอนทฤษฎีจลน์ของแก๊ส

โกวิท กิตติวุฒิสักดิ์

สาขาวิชาเคมี สำนักวิชาวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยวลัยลักษณ์ อำเภอท่าศาลา จังหวัดนครศรีธรรมราช 80161

kkowit@mail.wu.ac.th

บทคัดย่อ

แบบจำลองพลศาสตร์โมเลกุลทำให้นักศึกษาเคมีในชั้นปีที่หนึ่งสามารถเรียนรู้เรื่องทฤษฎีจลน์ของแก๊สผ่านการสังเกตและโต้ตอบกับการจำลองการเคลื่อนที่ของอนุภาคแก๊สเฉื่อยหลายร้อยอะตอมซึ่งจะดูกันเมื่ออยู่ใกล้กันแต่จะผลักกันเมื่ออยู่ติดกัน นักศึกษาสามารถเรียนรู้เรื่องแรง การเคลื่อนที่ในระดับอะตอม โดยเฉพาะทฤษฎีจลน์ของแก๊สในอุดมคติและแก๊สจริงจากแบบจำลองนี้ บทความนี้จะกล่าวถึงลักษณะพื้นฐานและความสามารถของแบบจำลอง นำเสนอการนำไปใช้เป็นแบบฝึกหัดในระดับง่ายและปานกลาง ตัวโปรแกรมถูกพัฒนามาให้ใช้งานได้ในระบบปฏิบัติการวินโดวส์และจะเปิดให้ดาวน์โหลดในอนาคต

คำสำคัญ: พลศาสตร์โมเลกุล, โปรแกรมคอมพิวเตอร์, ทฤษฎีจลน์ของแก๊ส, การสอนเคมี

บทนำ

ทฤษฎีที่ว่าสสารประกอบด้วยอะตอมเป็นรากฐานที่สำคัญของวิทยาศาสตร์สมัยใหม่ นักวิทยาศาสตร์ที่มากประสบการณ์สามารถมองเห็นสสารในเชิงคุณภาพและเข้าใจในระดับอะตอมเกี่ยวกับสมบัติพื้นฐานของแก๊สรวมไปถึงการเคลื่อนที่แบบบราวเนียน ถ้าทำการคำนวณและวิเคราะห์เพิ่มเติมต่อไปนักวิทยาศาสตร์สามารถทำความเข้าใจในเชิงปริมาณเกี่ยวกับสมบัติต่างๆ ของกฎทางเทอร์โมไดนามิกส์ สถิติของโบลต์แมนน์ และทฤษฎีจลน์ของแก๊ส แต่สำหรับนักศึกษาที่เพิ่งเริ่มเรียนจะไม่สามารถจินตนาการและเข้าใจปรากฏการณ์เหล่านี้ได้อย่างถูกต้อง ตัวอย่างเช่น นักศึกษาหลายคนประสบกับปัญหาในการนึกถึงภาพอะตอมที่เคลื่อนที่ตลอดเวลาและชนกันอย่างยืดหยุ่นโดยไม่มีสูญเสียพลังงานเมื่อเวลาผ่านไป แม้ว่าภาพเหล่านี้มีความสำคัญในการทำความเข้าใจว่าแก๊สมีความดันคงที่ได้อย่างไร นักเรียนเคมีจะเริ่มเรียนด้วยวิธีการเชิงปริมาณในการเรียนเทอร์โมไดนามิกส์แต่ความเข้าใจในเชิงคุณภาพจะยังมีน้อยเมื่อเทียบกับความเข้าใจเชิงสัญลักษณ์ ยิ่งไปกว่านั้นในระดับอุดมศึกษา การสอนเคมีเบื้องต้นยังจำกัดมุมมองแคบๆ เพียงระบบของแก๊สในอุดมคติซึ่งอนุภาคไม่มีแรงดึงดูดหรือแรงผลักกันเลย และระบบอยู่ในสมดุลแล้ว ซึ่งข้อจำกัดเหล่านี้จำเป็นในการคำนวณแบบง่าย ๆ ด้วยมือ

ในการที่จะข้ามข้อจำกัดเหล่านี้ นักวิจัยนิยมใช้การจำลองพลศาสตร์โมเลกุล [1-3] โดยวิธีนี้จะบูรณาการกฎข้อที่ 2 ของนิวตันในเชิงตัวเลขเพื่อคำนวณการเคลื่อนที่ของอนุภาคจำนวนมาก เทคนิคนี้สามารถคำนวณแรงระหว่างอนุภาคและสถานะที่ไม่อยู่ในสภาวะสมดุล แต่การคำนวณระบบใหญ่ ๆ ก็จะใช้ทรัพยากรในการคำนวณสูง พลศาสตร์โมเลกุลเริ่มถูกนำไปใช้ในการสอนวิทยาศาสตร์ในสองลักษณะด้วยกันคือ ในระดับประถมศึกษาเทคนิคนี้ถูกใช้ในรูปแบบของภาพยนตร์อนิเมชันเพื่อให้นักเรียนเข้าใจในเชิงคุณภาพเกี่ยวกับมุมมองในระดับอะตอมของสสารและความแตกต่างระหว่างของแข็ง ของเหลว และแก๊ส [4-8] ในระดับที่สูงขึ้นเอกสารและตำราเกี่ยวกับการคำนวณและการเขียนโปรแกรมในการจำลองพลศาสตร์โมเลกุล ได้ถูกจัดทำสำหรับผู้เรียนในการเรียนรู้แก้ไขดัดแปลงเพื่อทำการทดลองทางตัวเลขเชิงปริมาณด้วยตนเอง

จุดประสงค์ของบทความนี้คือการส่งเสริมให้มีการใช้การจำลองพลศาสตร์โมเลกุลในการสอนเคมีเบื้องต้นในระดับปริญญาตรี เพื่อให้นักศึกษาจะเข้าใจในมุมมองระดับอะตอมของสสารและนำไปประยุกต์ใช้ทั้งในเชิงคุณภาพและปริมาณกับปรากฏการณ์ต่างๆ ที่เกี่ยวข้อง ในหลายหัวข้อในการสอนเคมีพื้นฐานระดับอุดมศึกษา ผู้สอนมีโอกาสนำการจำลองพลศาสตร์โมเลกุลมาประยุกต์ใช้ ซึ่งในการเรียนในระดับนี้ นักศึกษาจะไม่มีเวลาที่จะเขียนโปรแกรมเองแต่ก็พร้อมในการทำความเข้าใจถึงหลักการและใช้โปรแกรมสำเร็จรูปเพื่อเรียนรู้และทำการทดลองเชิงตัวเลขด้วยตนเอง โดยโปรแกรมเหล่านี้มีอยู่แล้ว [4,9,10] แต่ก็ยังถูกใช้ไม่แพร่หลายนัก ความจำเป็นที่

ต้องมีโปรแกรมที่หลากหลายเพื่อใช้ในการเรียนการสอนหัวข้อต่างๆ ในทางเคมีในระดับปริญญาตรี ทำให้ผู้ทำวิจัยเริ่มต้นด้วย หัวข้อ ทฤษฎีจลน์ของแก๊ส ซึ่งเป็นความรู้พื้นฐานที่จำเป็นและง่ายที่จะนำการจำลองพลศาสตร์โมเลกุลมาประยุกต์ใช้ในการสอน

วิธีดำเนินการวิจัย

ใช้แบบจำลองจำลองพลศาสตร์โมเลกุลในรูปแบบที่ง่ายที่สุดโดยแบบจำลองประกอบด้วยอนุภาคทรงกลมจำนวน N อนุภาค ซึ่งมีอันตรกิริยาเป็นคู่ โดยใช้ฟังก์ชันพลังงานศักย์แบบ Lennard-Jones 6-12 [1-3,11,12],

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

โดยที่ r คือระยะห่างระหว่างจุดศูนย์กลางของคู่อนุภาค ส่วน σ และ ϵ คือค่าคงที่ จากสมการค่าพลังงานศักย์จะมีค่าต่ำสุดคือ $-\epsilon$ ที่ $r = 2^{1/6} \sigma$ และมีค่าสูงขึ้นอย่างมากเมื่อ $r < \sigma$ ซึ่ง σ ก็คือค่าประมาณเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาคนั้นเอง โดยเทอม r^{-6} ในสมการที่ 1 เกิดจากแรง van der Waals ระยะไกล [13,14] ส่วนเทอมแรงผลึก r^{-12} ยังไม่สามารถคำนวณได้จากการทดลองหรือ ทฤษฎีแต่ถูกเลือกเนื่องจากความสะดวกในการคำนวณ แต่ฟังก์ชันแบบนี้สามารถใช้ประมาณอันตรกิริยาของคู่อะตอมแก๊สได้อย่างดี [15] ในการคำนวณเราสามารถประมาณให้ σ และ ϵ มีค่าเท่ากับ 1 รวมทั้งมวลของอนุภาค (m) และค่าคงที่ของโบลต์แมนน์ (k_B) ให้เป็น 1 โดยเราเรียกระบบหน่วยแบบนี้ว่า natural unit system

แบบจำลองต้องมีเงื่อนไขของขอบเขตเพื่อป้องกันไม่ให้อนุภาคเคลื่อนที่หลุดออกไป ซึ่งนักศึกษาเข้าใจได้ง่ายกับแนวคิดของการที่โมเลกุลกระเด็นเมื่อเคลื่อนที่ไปกระทบกับกำแพง มันจะสมจริงมากกว่าที่จะจำลองการเคลื่อนที่ของอะตอมในสามมิติและสะดวกด้วยในการเปรียบเทียบผลเชิงปริมาณกับค่าจากการทดลอง แต่การจำลองในสองมิติก็สามารถแสดงหลักการต่างๆ ที่สำคัญได้ดีเช่นกัน และเป็นที่ยอมรับมากกว่าในประเด็นเรื่องการสอน โดยนักศึกษามองเห็นอะตอมทั้งหมดและโต้ตอบกับพวกมันโดยใช้เมาส์อย่างเป็นธรรมชาติในสองมิติ แต่กับสามมิติมันเป็นไปอย่างยากลำบาก อีกทั้งการจำลองในสองมิติใช้จำนวนอนุภาคน้อยกว่าทำให้อัตราเร็วในการแสดงผลเร็วกว่า

รายละเอียดของการคำนวณ

ในการคำนวณจะประยุกต์ใช้กฎข้อที่สองของนิวตันสำหรับอนุภาคจำนวน N ตัว วิธีง่ายๆ ที่ใช้กันคือ velocity Verlet algorithm โปรแกรมจะเก็บตำแหน่ง r_i ความเร็ว v_i และความเร่ง a_i ของอนุภาคที่ i จำนวน N อนุภาค แล้วทำการวนลูปเพื่อปรับตัวแปรเหล่านี้โดยการเพิ่มเวลาที่ละน้อยๆ (dt) ตามขั้นตอนต่อไปนี้

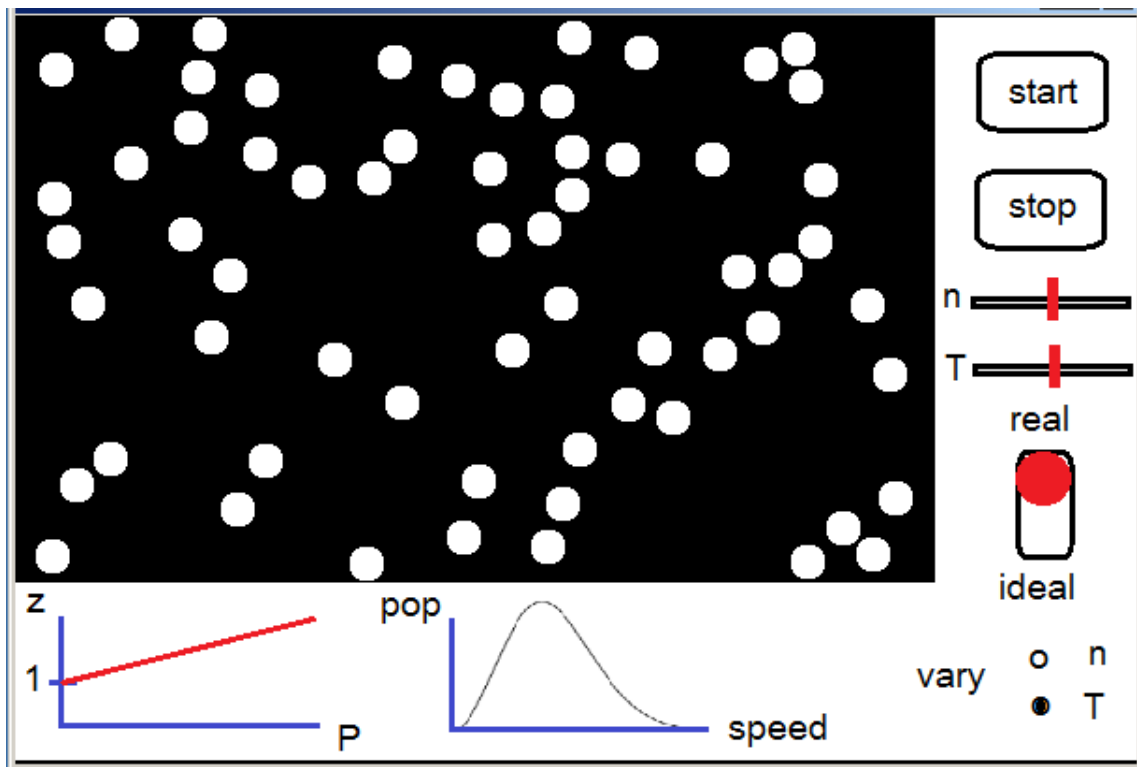
1. $r_i = r_i + v_i dt + 0.5 a_i (dt)^2$
2. $v_i = v_i + 0.5 a_i dt$
3. คำนวณความเร่งใหม่จากตำแหน่งใหม่โดยใช้แรงจากสมการ Lennard-Jones
4. $v_i = v_i + 0.5 a_i dt$

แบบจำลองจะทำงานได้เร็วขึ้นเมื่อค่า dt มีค่าสูงๆ แต่ความถูกต้องจะลดลงและนำไปสู่ความไม่เสถียรของแบบจำลอง โดยปกติจะใช้ค่า $dt = 0.01$ (natural units)

ผลและอภิปรายผล

เพื่อที่จะศึกษาพฤติกรรมที่แตกต่างกันของแก๊สในอุดมคติและแก๊สจริง ตัวโปรแกรมได้ออกแบบมาดังแสดงในรูปที่ 1 โดยกรอบสีดำที่กินพื้นที่ส่วนใหญ่เป็นกล่องในสองมิติที่อนุภาคสีขาวเคลื่อนที่ได้ ส่วนเมนูที่ใช้ในการโต้ตอบกับโปรแกรมอยู่ทางด้านขวามือ ประกอบไปด้วยปุ่ม start และ stop เพื่อใช้ในการเริ่มและหยุดแบบจำลอง สไลด์บาร์ตรงกลางใช้ในการตั้งค่าจำนวนอนุภาคและอุณหภูมิ เริ่มต้น ส่วนสวิตช์ด้านล่างเป็นการเลือกกระหว่างแก๊สจริง (แทนที่อนุภาคด้วยวงกลม) และแก๊สในอุดมคติ (แทนที่อนุภาคด้วยจุด) ใน

ส่วนของการเพิ่มความดันสามารถทำได้ในสองรูปแบบคือการเพิ่มจำนวนอนุภาคหรือการเพิ่มอุณหภูมิ ในบริเวณใต้กล่องเป็นการพล็อตกราฟระหว่างค่าองค์ประกอบของการอัดตัว หรือ $z = PV/nRT$ vs P และการกระจายตัวของความเร็วของอนุภาค



รูปที่ 1 แสดงโปรแกรมที่กำลังทำงาน

สรุปผลการวิจัย

แบบจำลองนี้สามารถช่วยนักศึกษาในการทำความเข้าใจเกี่ยวกับแบบจำลองของแก๊สในอุดมคติและแก๊สจริง โดยการจำลองการเคลื่อนที่อย่างสมจริงของอนุภาคแก๊สในสองมิติด้วยจุดและวงกลม และเชื่อมโยงไปยังสมบัติเชิงปริมาณคือค่าองค์ประกอบของการอัดตัว ซึ่งจะมีค่าเท่ากับ 1 ในกรณีของแก๊สในอุดมคติ ส่วนในกรณีของแก๊สจริง(แก๊สเฉื่อย) จะมีความชันคงที่

บรรณานุกรม

- [1] M. P. Allen and D. J. Tildesley. Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987.
- [2] J. M. Haile. Molecular Dynamics Simulation. Wiley, New York, 1992.
- [3] D. C. Rapaport. The Art of Molecular Dynamics Simulation. 2nd ed. Cambridge U.P. Cambridge, 2004.
- [4] Stark Design. Atomic Microscope. Windows and Mac Classic application.
- [5] S. Carlson. Modeling the atomic universe. Sci. Am. 1999; 281(4), 118-119.
- [6] Atoms in Motion LLC. Atoms in Motion (iPad app). สืบค้นเมื่อ 12 ธันวาคม 2560 จาก <http://www.atomsinmotion.com>.
- [7] PhET project, States of Matter (JAVA Web Start application). สืบค้นเมื่อ 12 ธันวาคม 2560 จาก <http://phet.colorado.edu/en/simulation/states-of-matter>.
- [8] The Concord Consortium, Molecular Workbench (JAVA simulations and modeling tools). สืบค้นเมื่อ 12 ธันวาคม 2560 จาก <http://mw.concord.org>.
- [9] Boston University Center for Polymer Studies. Virtual Molecular Dynamics Laboratory. สืบค้นเมื่อ 12 ธันวาคม 2560 จาก <http://polymer.bu.edu/vmdl>.

- [10] H. Gould and J. Tobochnik. Statistical and Thermal Physics: With Computer Applications. Princeton U.P., Princeton, 2010.
- [11] H. Gould, J. Tobochnik and W. Christian. An Introduction to Computer Simulation Methods. 3rd ed. Pearson Addison Wesley, San Francisco, 2007.
- [12] N. J. Giordano and H. Nakanishi. Computational Physics. 2nd ed. Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2006.
- [13] B. R. Holstein. The van der Waals interaction. Am. J. Phys. 2001; 69(4), 441-449.
- [14] K. A. Milton. Resource Letter VWCPF-1: van der Waals and Casimir- Polder forces. Am. J. Phys. 2011; 79(7), 697-711.
- [15] G. Maitland, M. Rigby, E. B. Smith and W. A. Wakeham Intermolecular Forces: Their Origin and Determination. Clarendon Press, Oxford, 1981.