

Молекулярная Динамика

Каразеев Антон, 493 группа

МФТИ, 2017

План

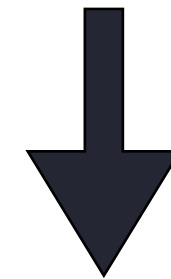
- Потенциал Леннард-Джонса [3]
- Интегрирование Верле [4]
- Температура [5]
- Энергия [6]
- Распределение Максвелла [7]
- Функция радиального распределения [8]
- Расчёт давления [9]
- Флуктуации [10]
- Уравнение состояния Леннард-Джонсовской жидкости [12]
- Визуализация с помощью VMD [13]
- Список литературы [14]

Потенциал Леннард-Джонса

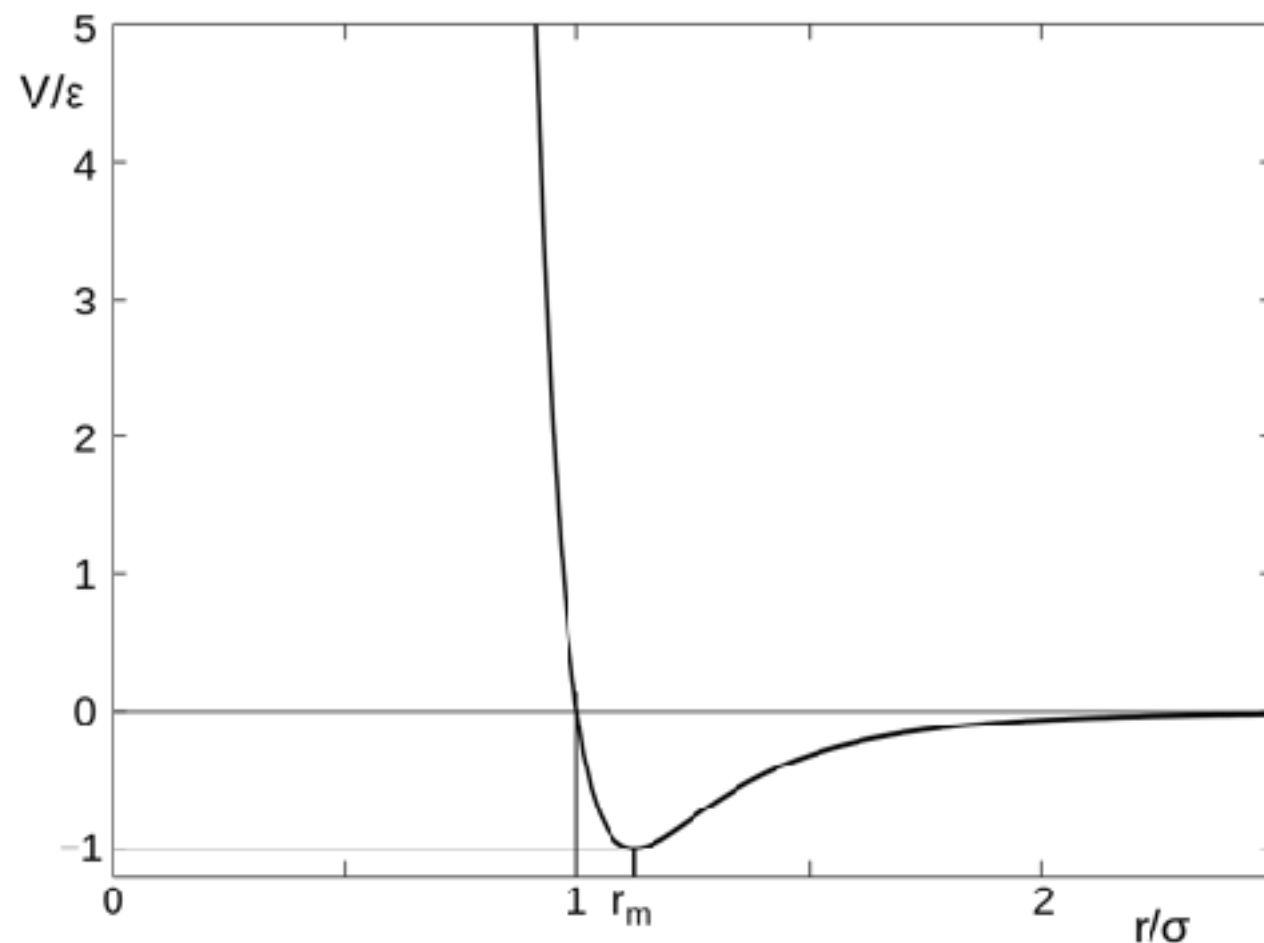
$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

$$u^* \equiv u/\epsilon$$

$$r^* \equiv r/\sigma$$



$$u^{*lj}(r^*) = 4 \left[\left(\frac{1}{r^*} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r^*} \right)^6 \right]$$



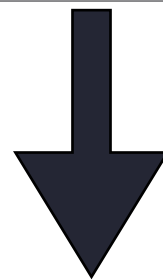
Quantity	Reduced units		Real units	
temperature	$T^* = 1$	\leftrightarrow	$T = 119.8 \text{ K}$	
density	$\rho^* = 1.0$	\leftrightarrow	$\rho = 1680 \text{ kg/m}^3$	
time	$\Delta t^* = 0.005$	\leftrightarrow	$\Delta t = 1.09 \times 10^{-14} \text{ s}$	
pressure	$P^* = 1$	\leftrightarrow	$P = 41.9 \text{ MPa}$	

Данные для Аргона

Интегрирование Верле

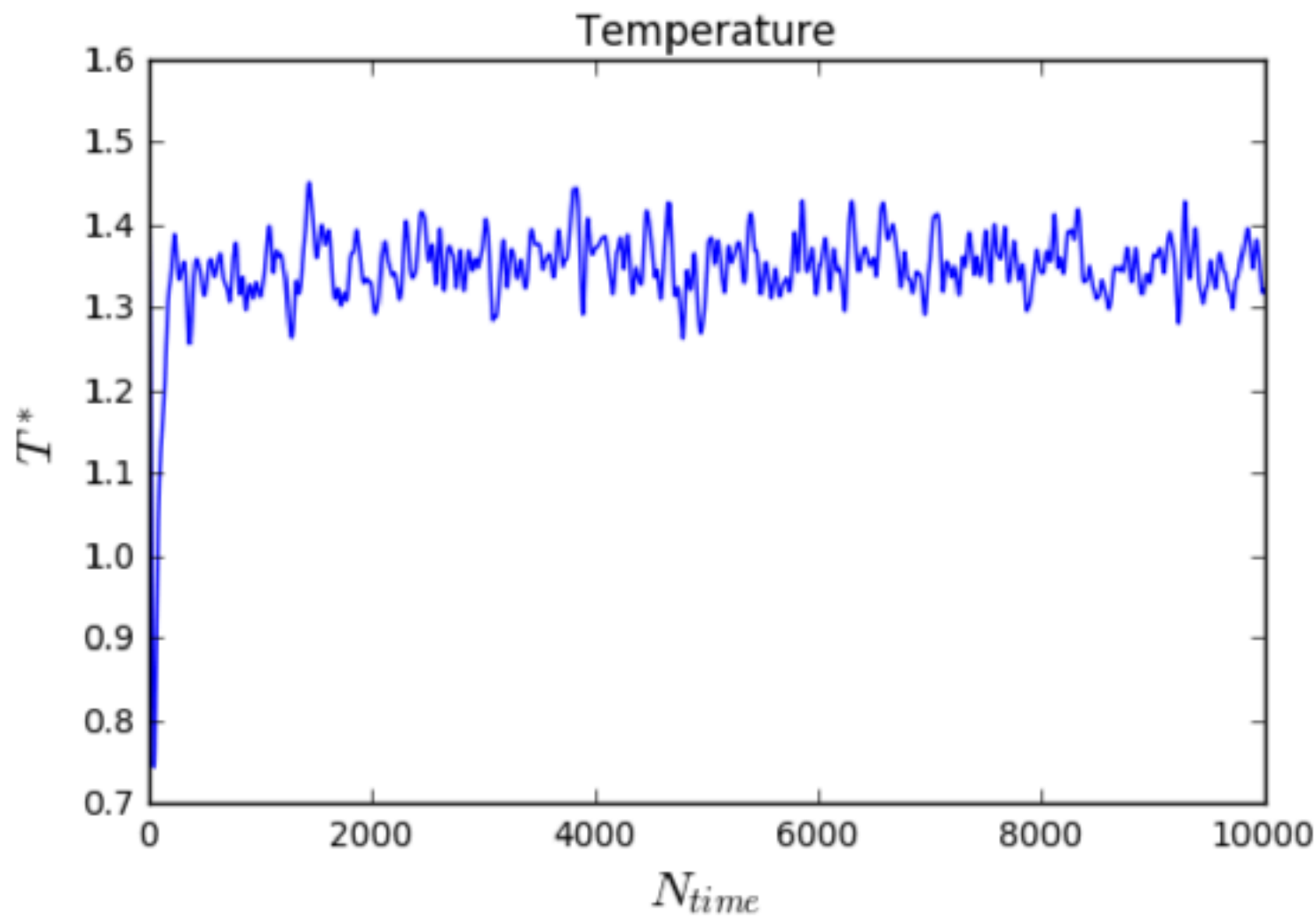
Метод Верле более устойчив, чем более простой метод Эйлера

$$\begin{aligned}\vec{x}(t + \Delta t) &= \vec{x}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2} + \frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6} + O(\Delta t^4) \\ \vec{x}(t - \Delta t) &= \vec{x}(t) - \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2} - \frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6} + O(\Delta t^4)\end{aligned}$$



$$\vec{x}(t + \Delta t) = 2\vec{x}(t) - \vec{x}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$$

Температура

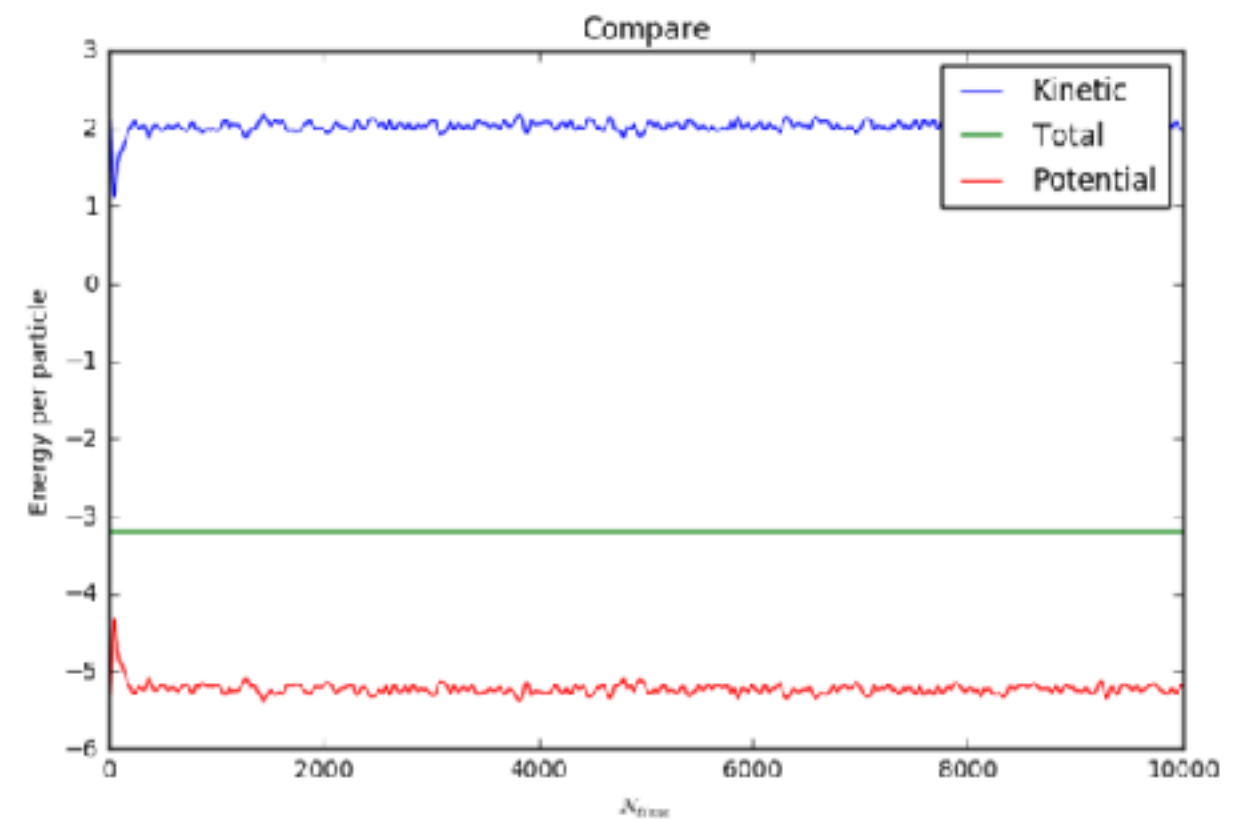
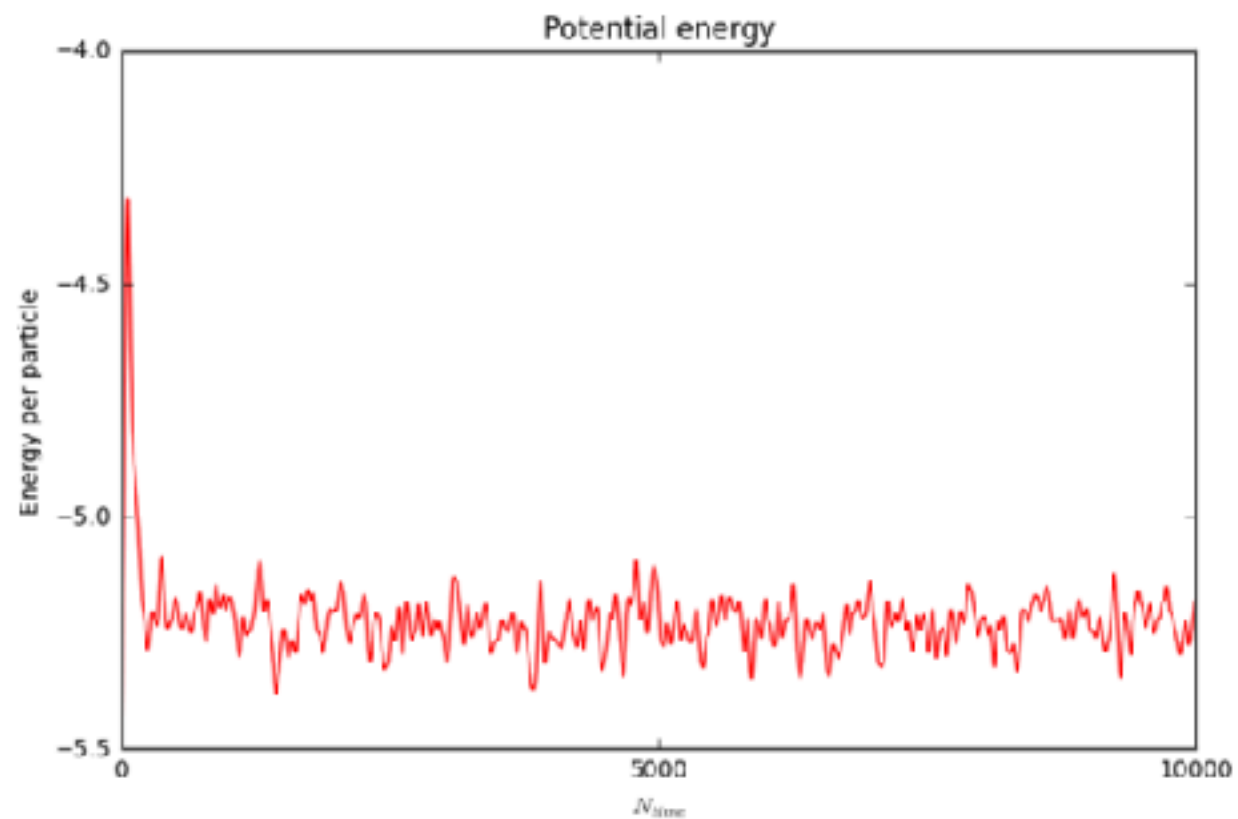
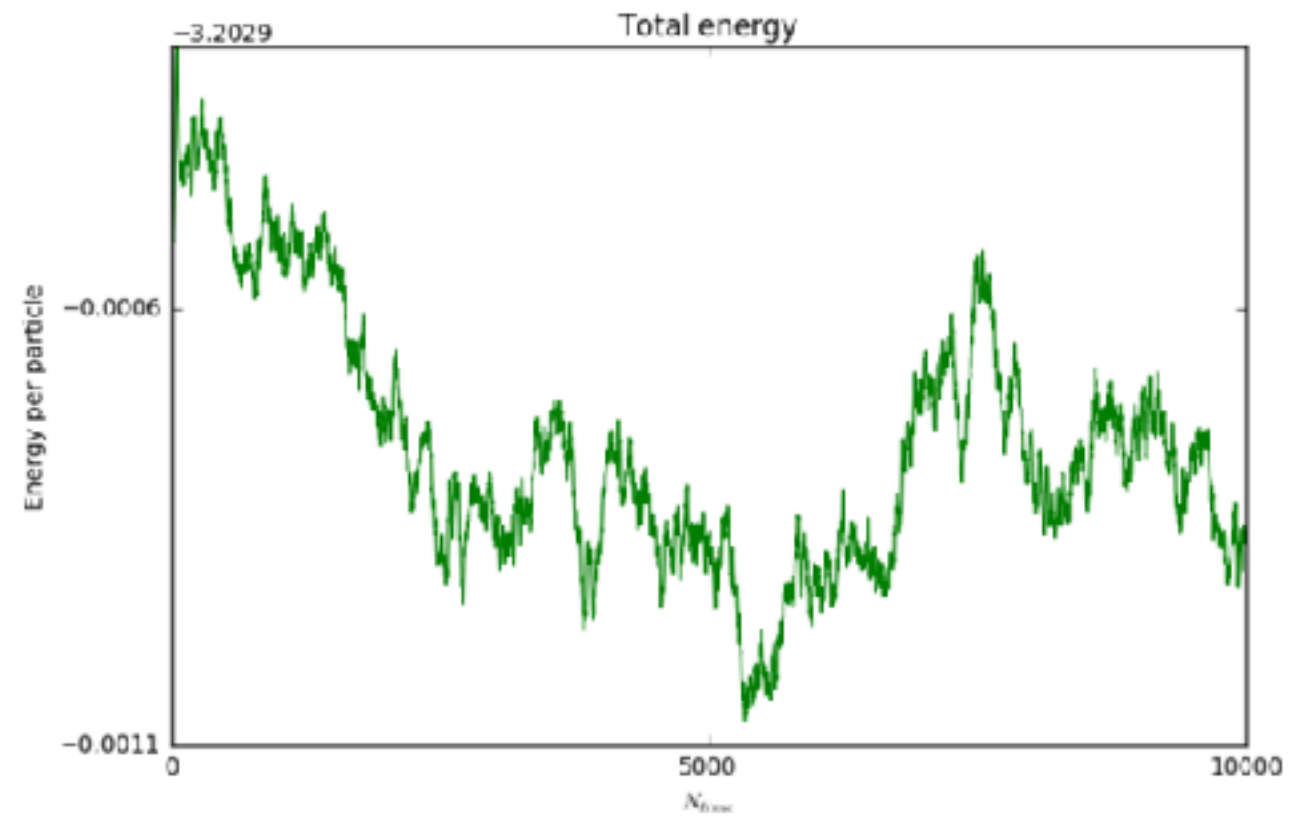
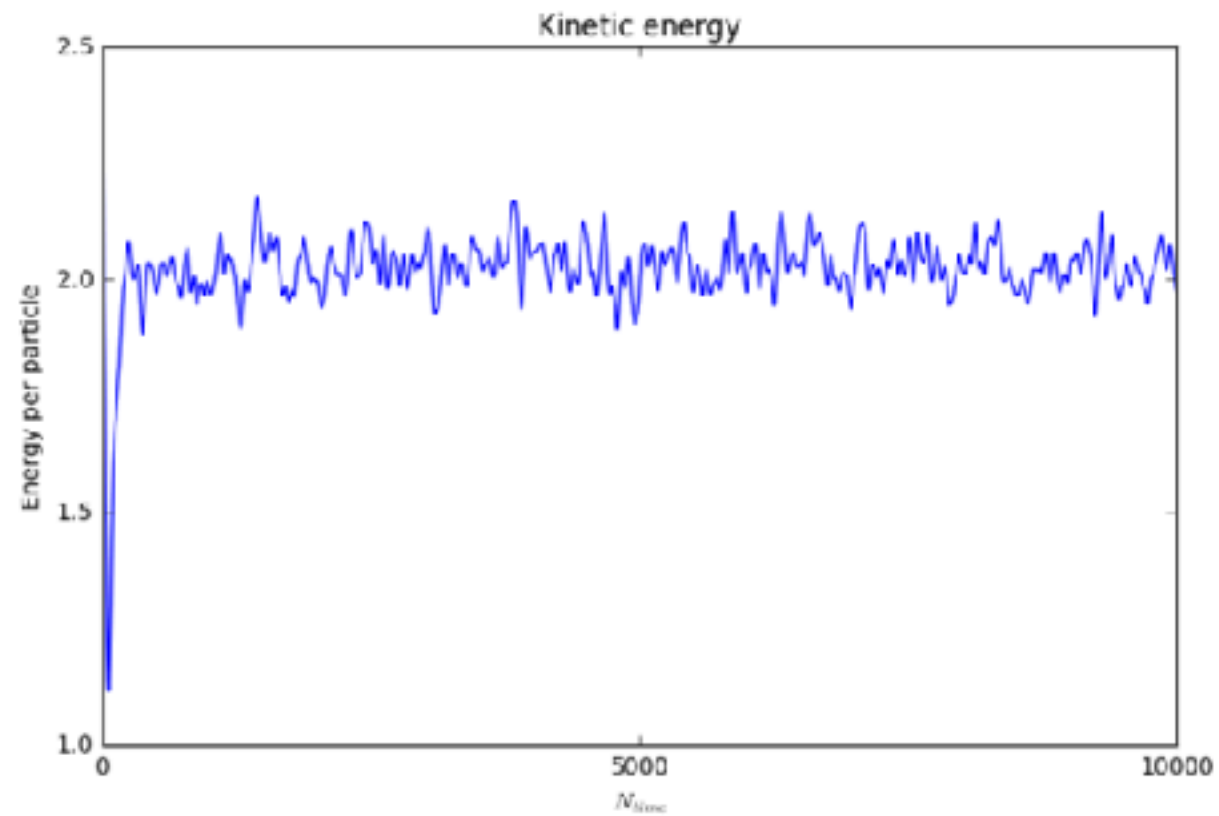


$$T(t) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2(t)}{k_B N_f}$$

Среднее значение: 1.3475929108

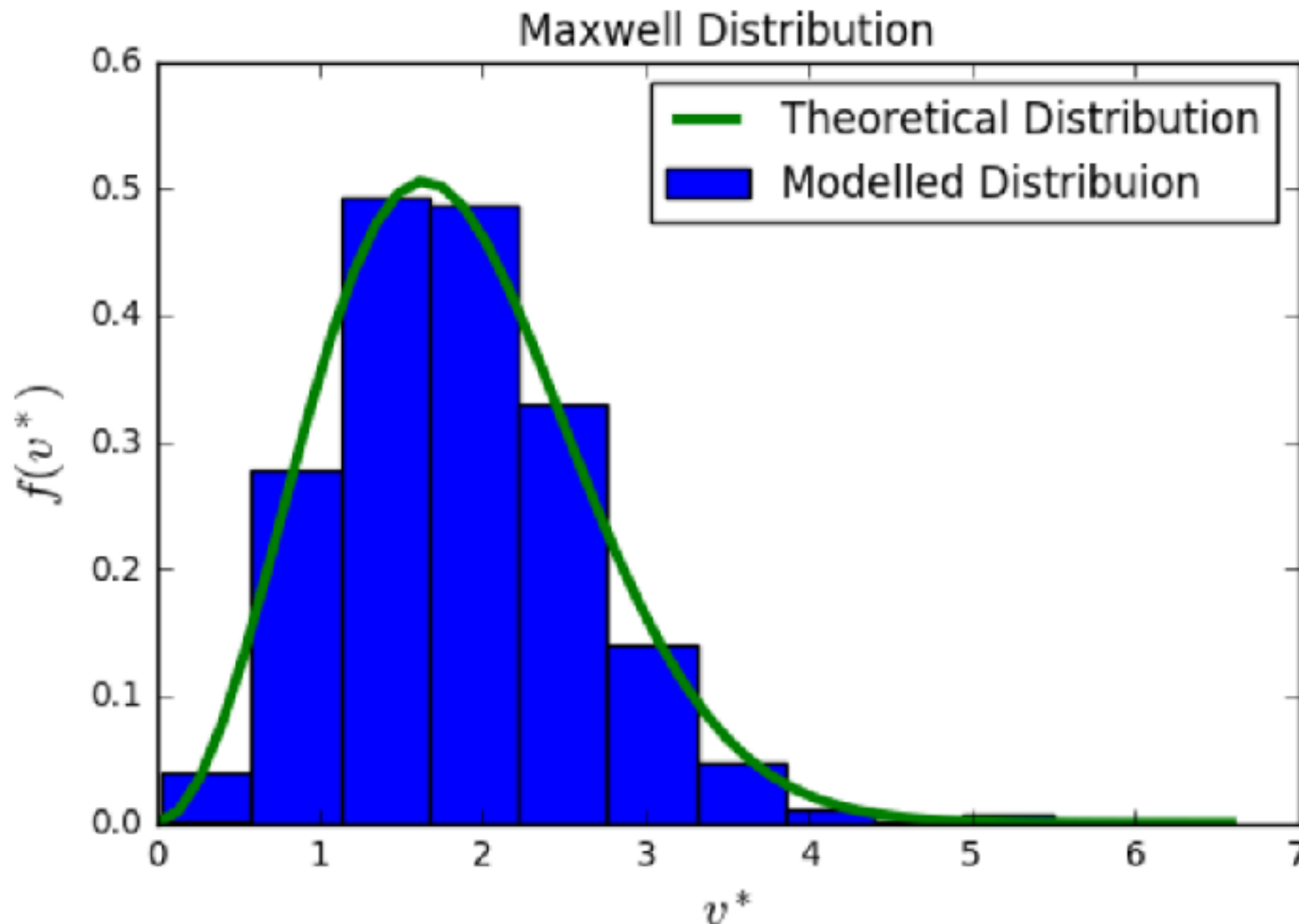
Дисперсия: 0.00276907131449

Энергия

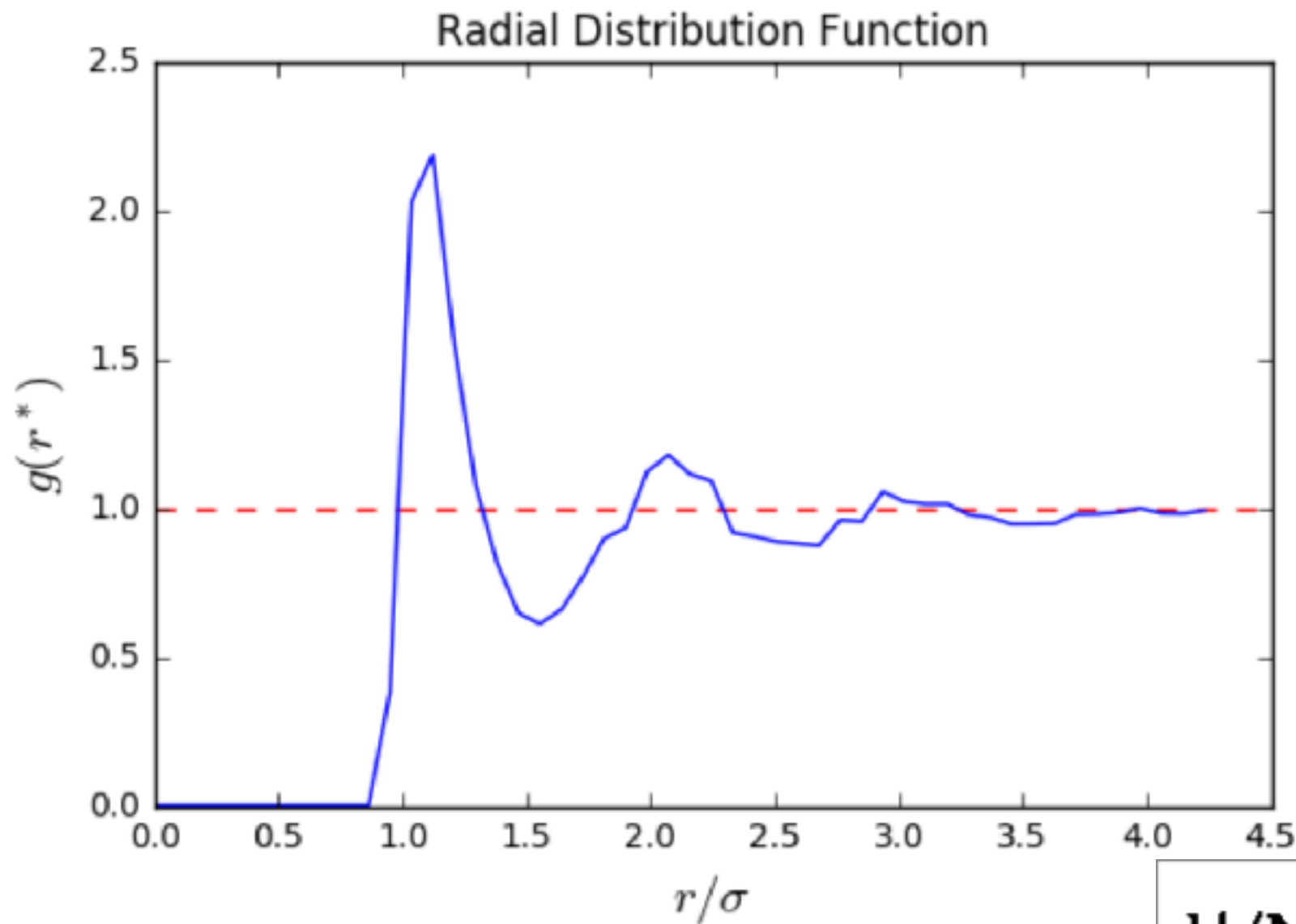


Распределение Максвелла

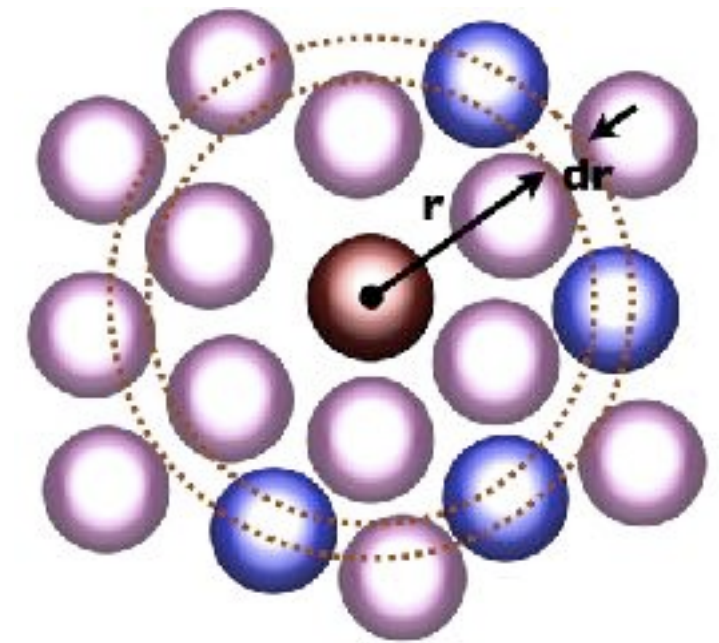
$$f(v)dv = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT} \right) dv$$



Функция радиального распределения

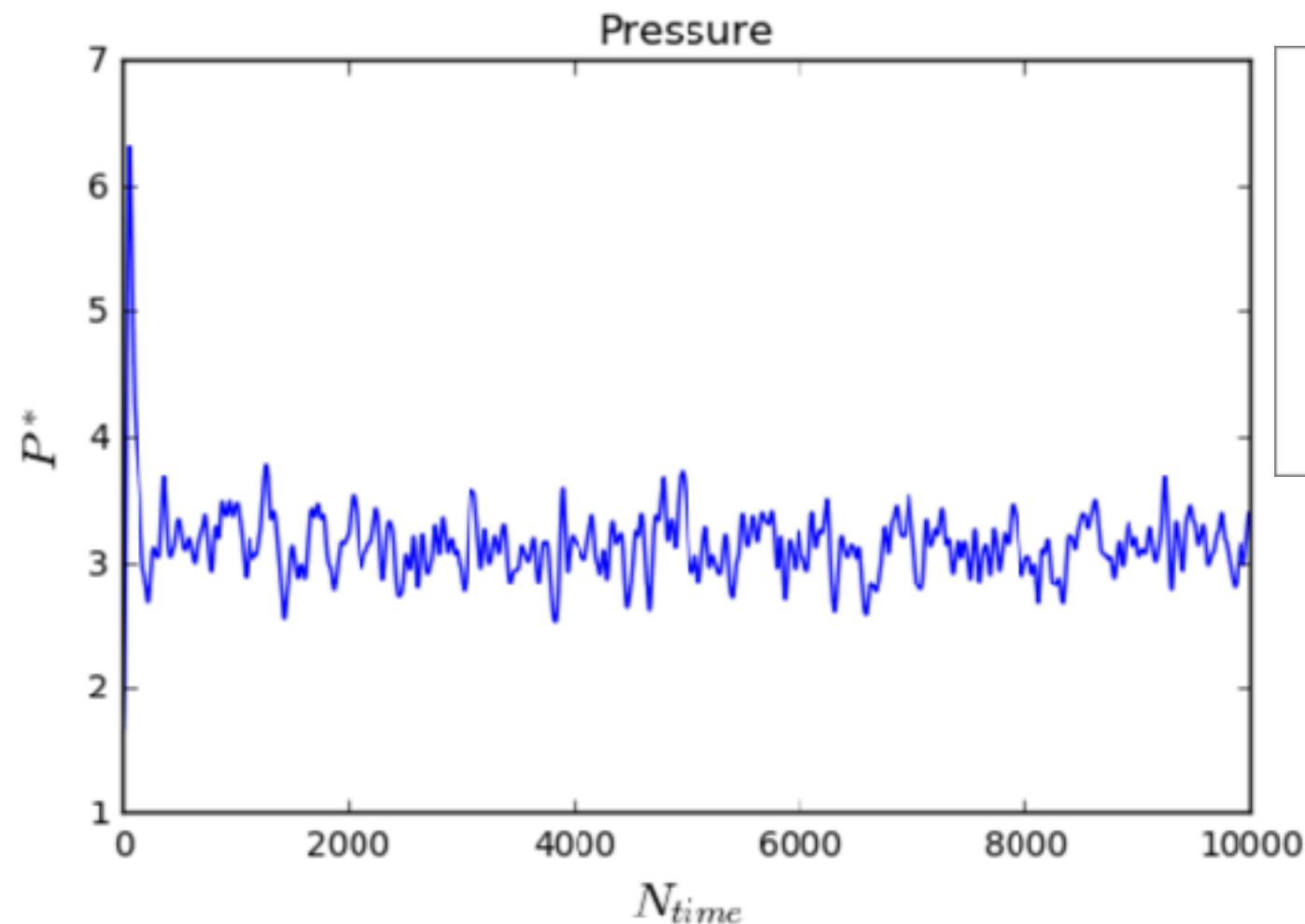


Потенциальная энергия на частицу: -5.25945299116



$$\begin{aligned} u/N &= \frac{1}{2} \rho \int_0^\infty dr u(r) g(r) \\ &= 2\pi \rho \int_0^\infty dr r^2 u(r) g(r) \end{aligned}$$

Расчёт давления



Среднее значение: 3.1377029377
Дисперсия: 0.0891742666069

$$P = \rho k_B T + \frac{1}{dV} \left\langle \sum_{i < j} \mathbf{f}(\mathbf{r}_{ij}) \cdot \mathbf{r}_{ij} \right\rangle$$

, где d - размерность системы

$$P = \rho k_B T - \frac{1}{3} \frac{1}{2} \rho^2 \int_0^\infty d\mathbf{r} \frac{du(r)}{dr} r g(r)$$

$$= \rho k_B T - \frac{2}{3} \pi \rho^2 \int_0^\infty dr \frac{du(r)}{dr} r^3 g(r)$$

Плотность: 0.8442
Давление: 3.0419538817

Значения давления,
полученные двумя
способами, согласуются
между собой

Флуктуации

$$\frac{\sqrt{\Delta F^2}}{\bar{F}} = \frac{1}{N^{1/2}} \frac{\sqrt{\Delta f^2}}{\bar{f}} \sim N^{-1/2}$$

Относительная флуктуация
уменьшается с ростом числа
частиц в системе и при больших N
она очень мала

$$\delta F = \pm \sqrt{(F - \bar{F})^2} = \pm \sqrt{(\Delta F)^2}$$

Абсолютная среднеквадратичная
флуктуация

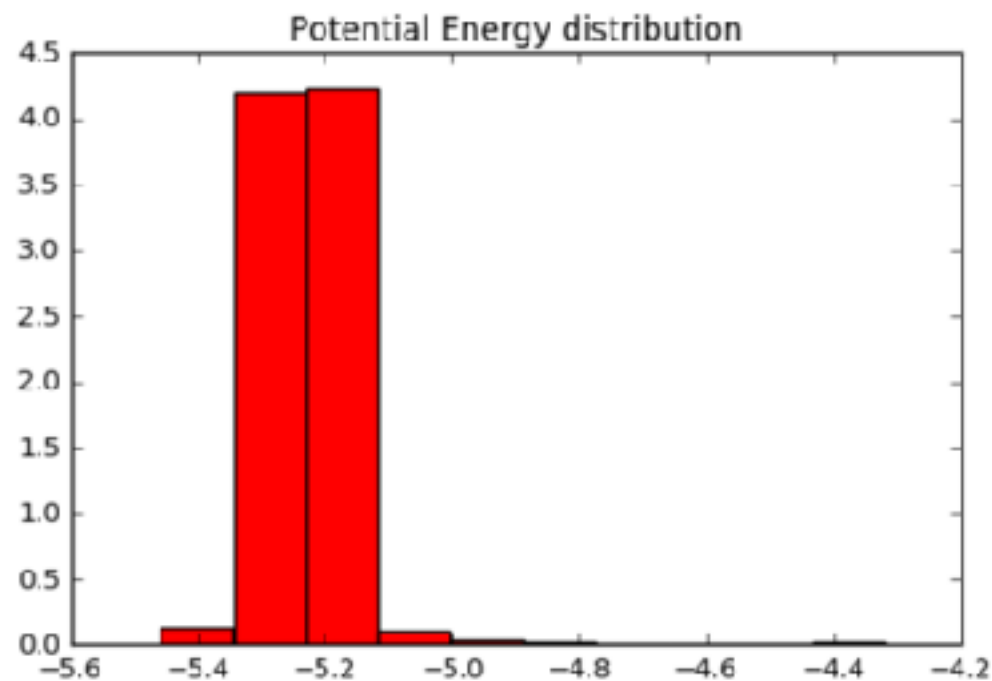
$$\delta F / \bar{F}$$

Относительная среднеквадратичная
флуктуация

$$W = \frac{1}{\sqrt{2\pi(F - \bar{F})^2}} \cdot \exp\left(-\frac{(F - \bar{F})^2}{2(F - \bar{F})^2}\right)$$

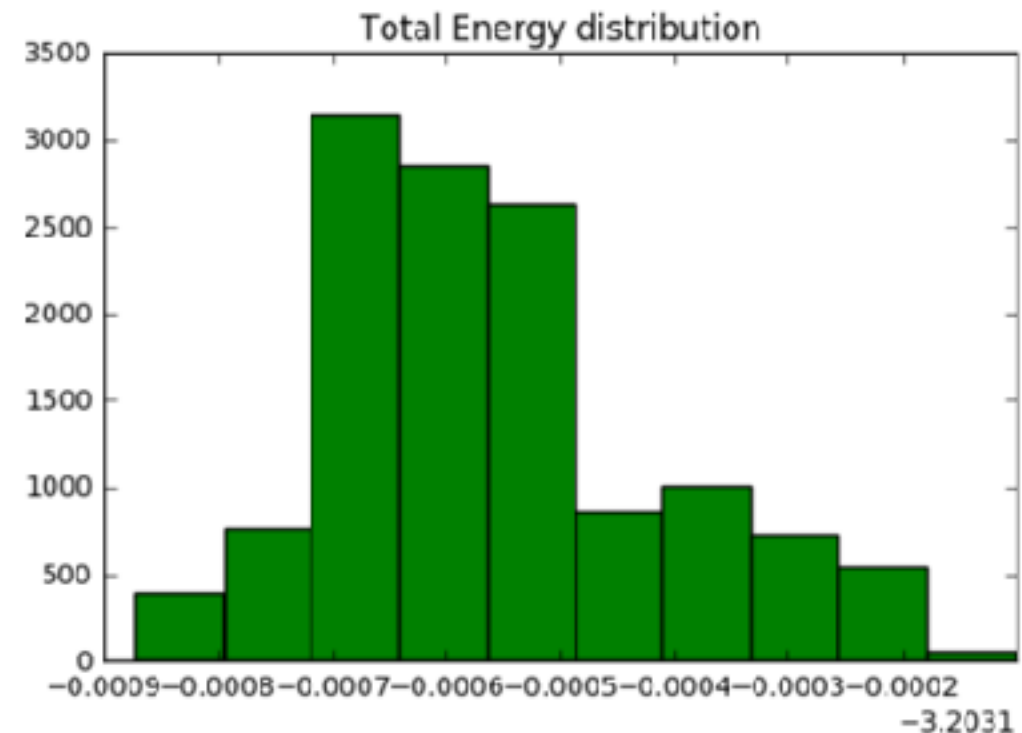
В равновесных системах случайная
величина F часто оказывается
распределенной около своего
среднего значения по
нормальному закону

Флуктуации



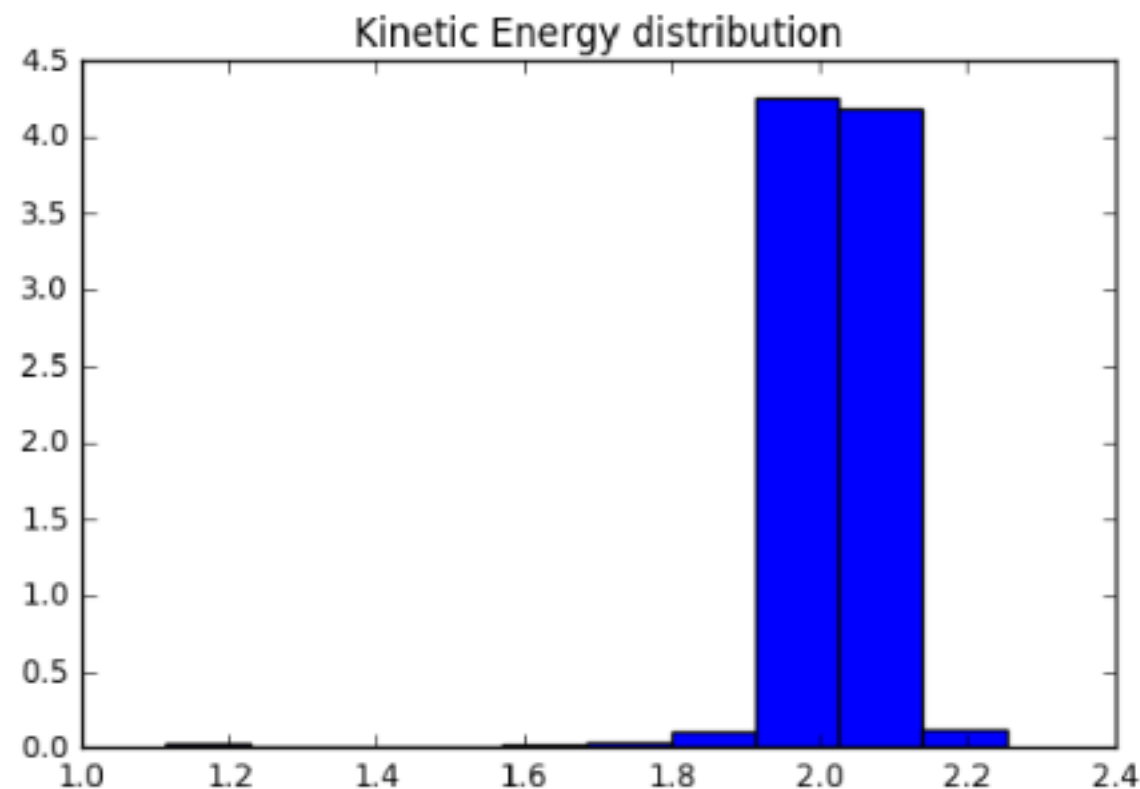
Среднее значение: -5.225047142

Относительная среднеквадратичная флуктуация: 0.0151151942524



Среднее значение: -3.203657781

Относительная среднеквадратичная флуктуация: 4.56483135623e-05



Среднее значение: 2.021389367

Относительная среднеквадратичная флуктуация: 0.0390488606655

Значение получено с помощью
функции радиального распределения:

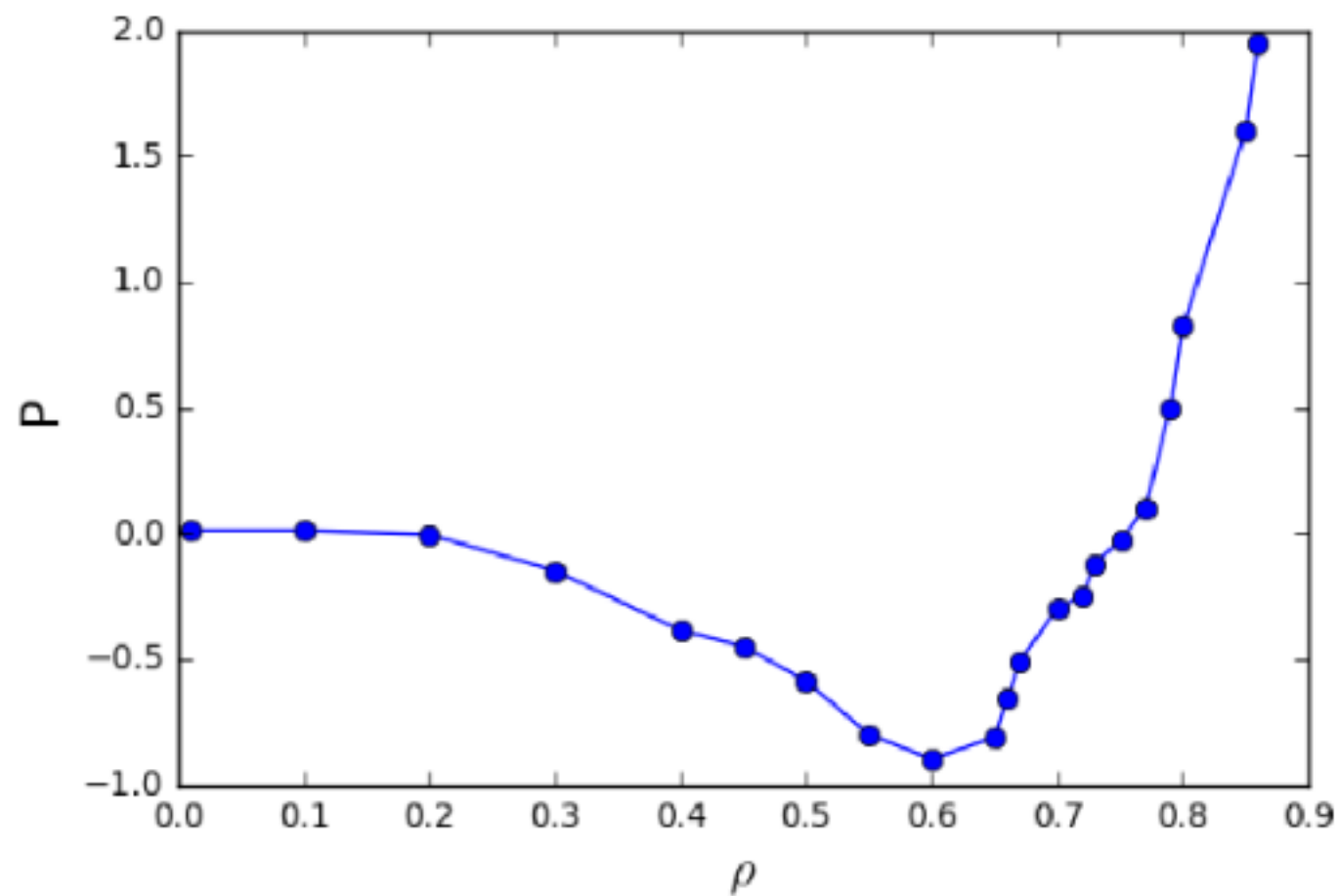
Потенциальная энергия на частицу: -5.25945299116

Что согласуется с экспериментальным
средним значением
потенциальной энергии

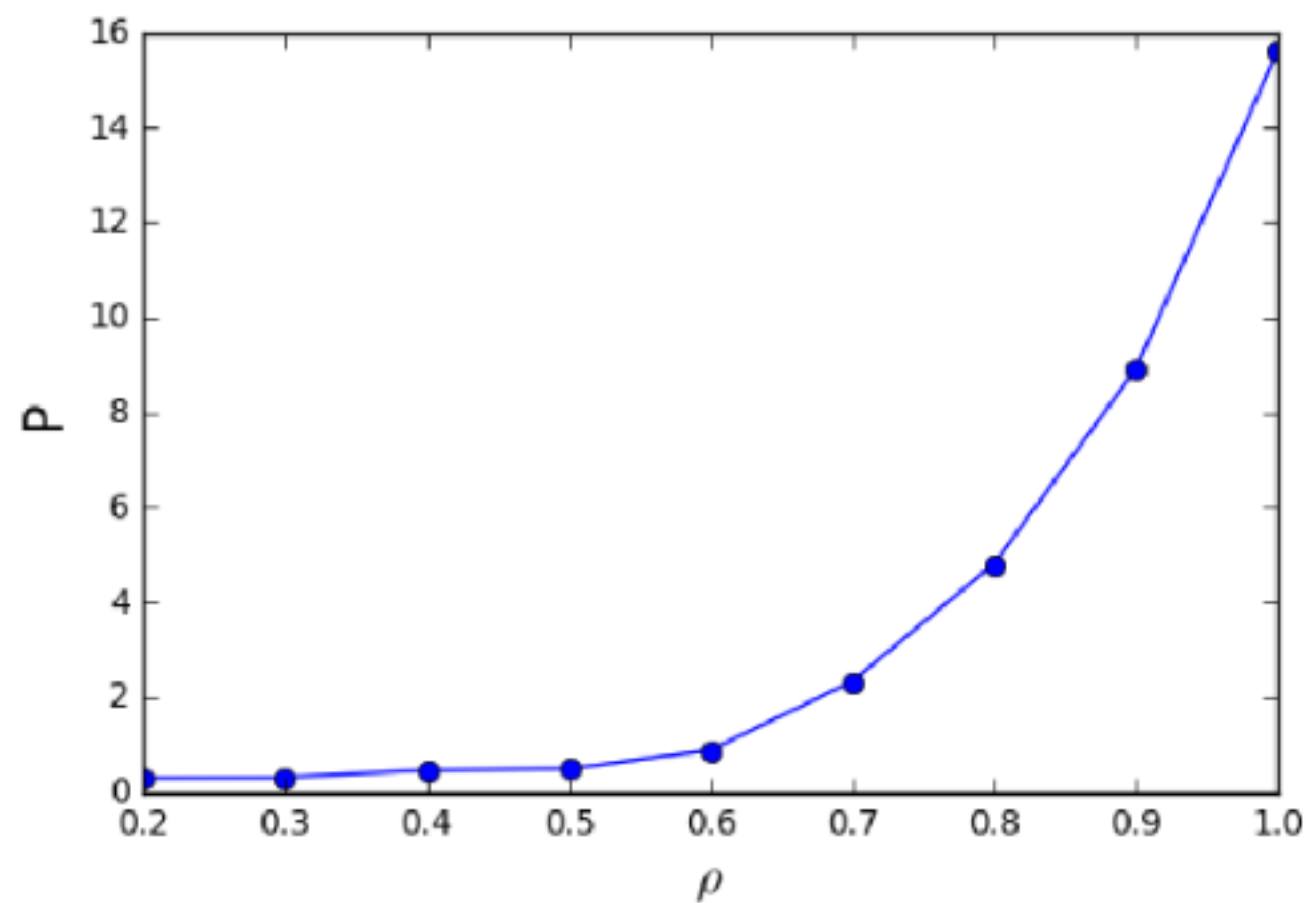
Уравнение состояния Леннард-Джонсовской жидкости

125 атомов

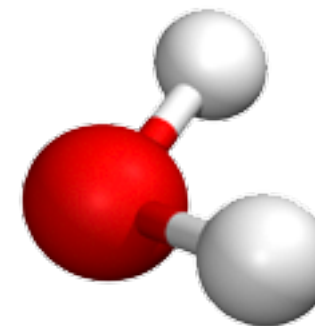
Изотерма при
температуре ниже
критической: $T=0.9$



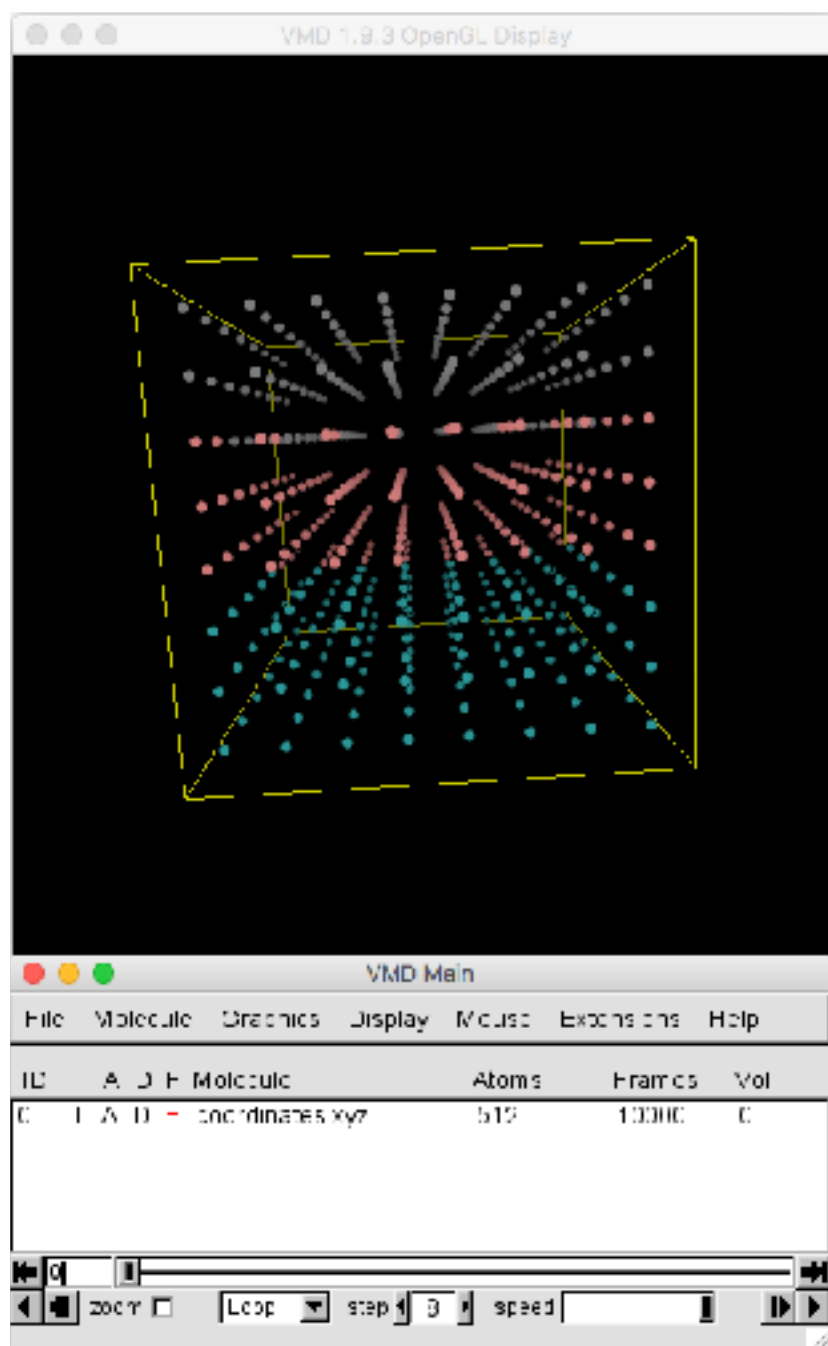
Изотерма при
температуре $T=2.0$



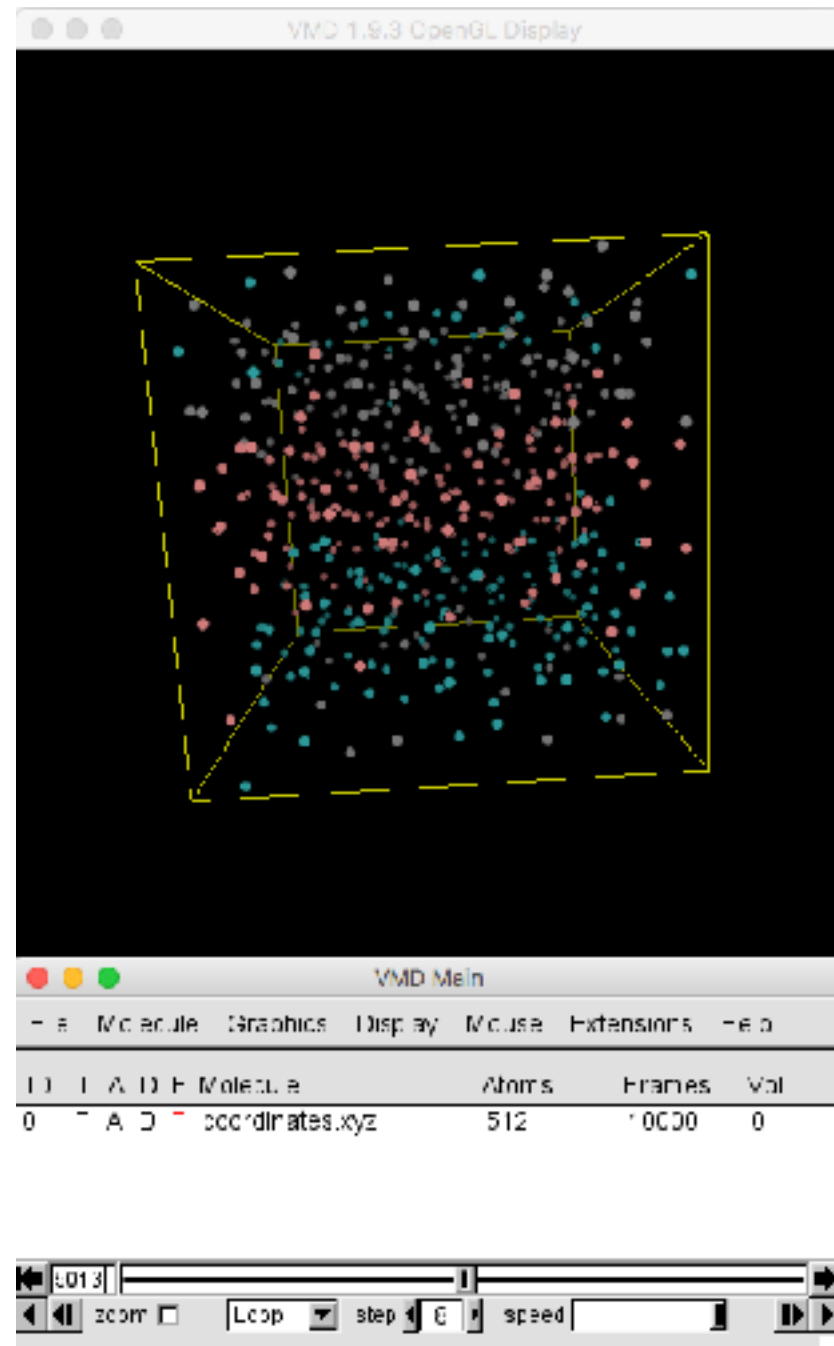
Визуализация с помощью VMD



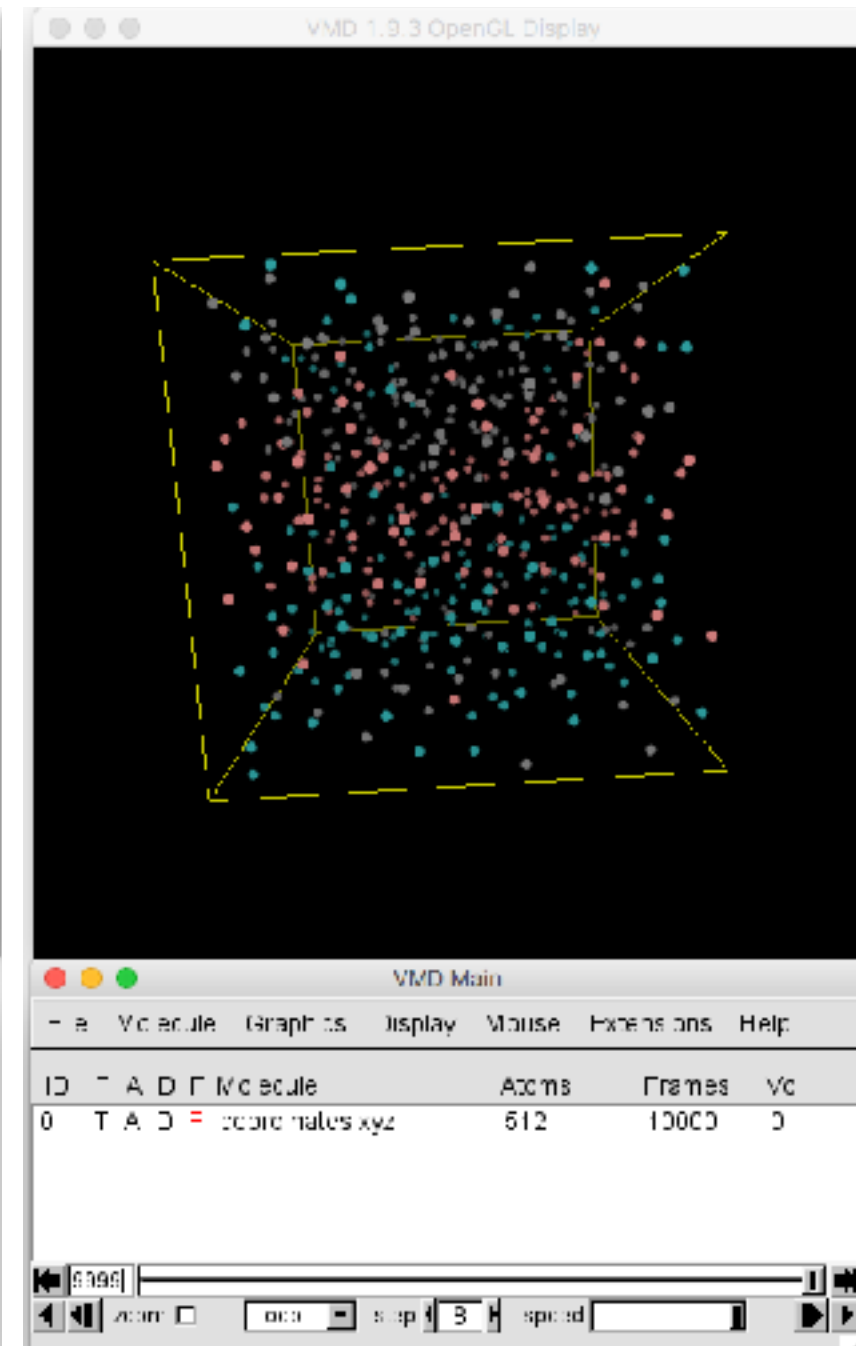
512 атомов



0/10000



5013/10000



9999/10000

Список литературы

- 1. *Прут Э.В., Кленов С.В., Овсянникова О.Б.* Элементы теории флуктуаций и броуновского движения в молекулярной физике - М.: МФТИ, 2002.
- 2. *Frenkel D., Smit B.* Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications - Academic Press, 2002.