

Санкт-Петербургский государственный университет

Кафедра параллельных алгоритмов

Группа 21.Б11-мм

Взаимодействие молекулы газа или
жидкости из выделенного распределения с
ближайшими атомами поверхности
металлов

Ольховский Никита Сергеевич

Отчёт по учебной практике в форме «Производственное задание»

Научный руководитель:
профессор кафедры параллельных алгоритмов, д.ф.-м.н., Э. В. Прозорова

Санкт-Петербург
2023

Оглавление

Введение	3
1. Постановка задачи	4
2. Обзор	5
2.1. Молекулярная динамика	5
2.2. Потенциал Леннарда-Джонса	6
2.3. Потенциал Морзе	7
2.4. Ovito	8
3. Реализация	10
3.1. Формулы и вычисления	10
3.2. Начальные данные и хранение	11
3.3. Вывод результатов в файл	12
Заключение	13
Список литературы	14

Введение

В современном мире большую роль играют сложные технологические системы. Металлы, благодаря своей высокой прочности, стойкости к коррозии, а также высоким показателям теплопроводности, используются в большинстве таких систем, включая производство автомобилей, летательных аппаратов, судов, электроники, получении наноструктур.

Вместе с тем изучение взаимодействия газа и жидкости с поверхностью металлов является важным аспектом при проектировании таких систем, потому что при контакте металлов с внешней средой происходит химическое взаимодействие, которое может изменить свойства металла и привести к его разрушению.

Однако, главная проблема при анализе таких систем заключается в их сложности. Произвести полный расчёт результата взаимодействия вручную, практически, невозможно, в связи с огромным количеством данных и вычислений, а для проведения эксперимента требуется значительное количество ресурсов. [5] В связи с этим возникла необходимость применения методов компьютерного моделирования — молекулярной динамики. Она позволяет использовать ЭВМ для вычисления позиций и векторов скорости молекул в течение фиксированного числа поколений, что в результате даёт видимость развития системы.

Последние эксперименты в области взаимодействия молекул показали некоторые новые эффекты, связанные со скольжением газа и жидкости о металлическую поверхность. Для построения новой теории планируется реализовать программу по симуляции такого взаимодействия.

1. Постановка задачи

Целью работы является реализация программы, моделирующей взаимодействие молекул газа или жидкости с металлической поверхностью. Для её выполнения были поставлены следующие задачи:

1. Разработать формулу движения молекул газа и металла;
2. Реализовать метод применения формулы к позициям молекул;
3. Реализовать выходной файл с данными о позициях молекул на каждом шаге.

2. Обзор

Моделирование системы взаимодействующих частиц — это процесс создания компьютерной модели, которая описывают движение и взаимодействие между отдельными частицами в системе. Мы рассмотрим метод молекулярной динамики как один из наиболее широко используемых, а также проведём обзор средств и инструментов для моделирования взаимодействующих частиц.

2.1. Молекулярная динамика

Основой метода молекулярной динамики является использование законов Ньютона для моделирования движения атомов и молекул в системе.[3] В нашем случае будет использован второй закон, благодаря которому мы вычислим ускорение в смысле классической механики, он имеет вид:

$$m\vec{a} = \vec{F}(R),$$

где m — масса молекулы;

\vec{a} — вектор ускорения;

$\vec{F}(R)$ — вектор силы;

R — расстояние между молекулами.

Для реализации метода молекулярной динамики необходимо выполнить следующие шаги[2]:

1. Определить начальные координаты и скорости частиц в системе. Они могут быть получены из экспериментов или расчетов.
2. Определить потенциальную энергию системы на основе взаимодействия между частицами. Это может быть сделано на основе уравнения Шредингера или классической модели взаимодействия между частицами.

3. Вычислить силы между частицами в системе на основе потенциальной энергии и ее градиента. Для этого мы воспользуемся потенциалом Леннарда-Джонса и потенциалом Морзе.
4. Проинтегрировать уравнение движения Ньютона для каждой частицы, чтобы определить ее новое положение и скорость.
5. Повторить шаги 3-4 для каждого временного шага, чтобы смоделировать эволюцию системы для заданного времени.

2.2. Потенциал Леннарда-Джонса

Потенциал Леннарда-Джонса — это функция потенциальной энергии, которая описывает взаимодействие между двумя немагнитными атомами или молекулами.

Формула потенциала Леннарда-Джонса выглядит следующим образом:

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

где $V(R)$ — потенциальная энергия между двумя частицами;

R — расстояние между молекулами;

ϵ — глубина потенциальной ямы;

σ — расстояние наименьшего отталкивания.

Этот потенциал обладает двумя основными частями: отталкивающей частью (которая моделирует отталкивание между атомами на близких расстояниях) и притягивающей частью (которая моделирует притяжение между атомами на больших расстояниях).

На рисунке ниже показана графическая зависимость потенциала Леннарда-Джонса от расстояния между двумя частицами:

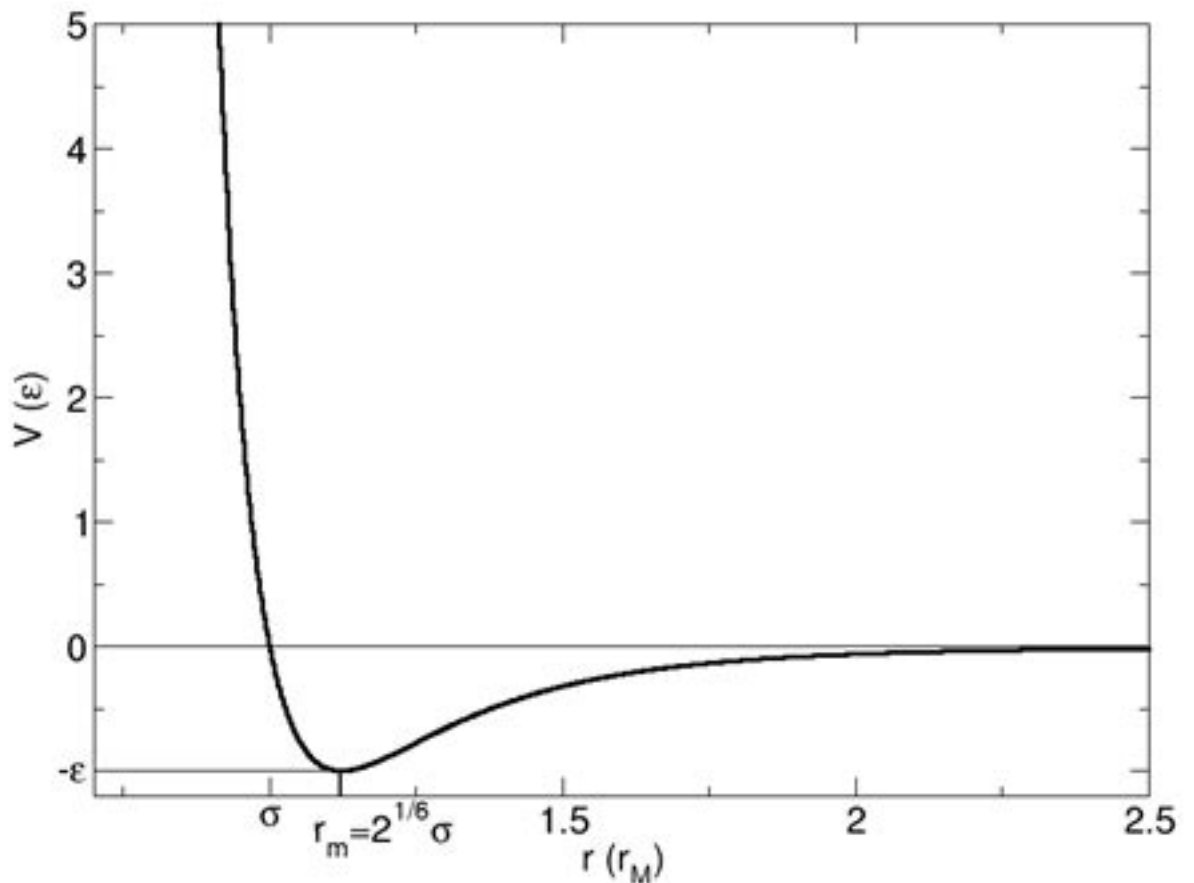


Рис. 1 — График потенциала Леннарда-Джонса

Из графика видно, что на близких расстояниях сила отталкивания между частицами резко возрастает, что препятствует сближению. На больших расстояниях притягивающая часть потенциала доминирует, что приводит к образованию устойчивого взаимодействия между частицами.

2.3. Потенциал Морзе

Потенциал Морзе — это функция, используемая в нашем случае для описания потенциальной энергии взаимодействия между двумя атомами металла.

Формула потенциала Морзе выглядит следующим образом[1]:

$$V(R) = \epsilon[e^{-2\alpha(R-\sigma)} - 2e^{-\alpha(R-\sigma)}],$$

где $V(R)$ — потенциальная энергия между двумя частицами;

R — расстояние между молекулами;

α — константа, определяющая жесткость связи.

σ — расстояние наименьшего отталкивания

Потенциал Морзе имеет форму ямы с конечной глубиной и бесконечной высотой на бесконечности. Это позволяет использовать его для моделирования различных физических процессов, включая наш.

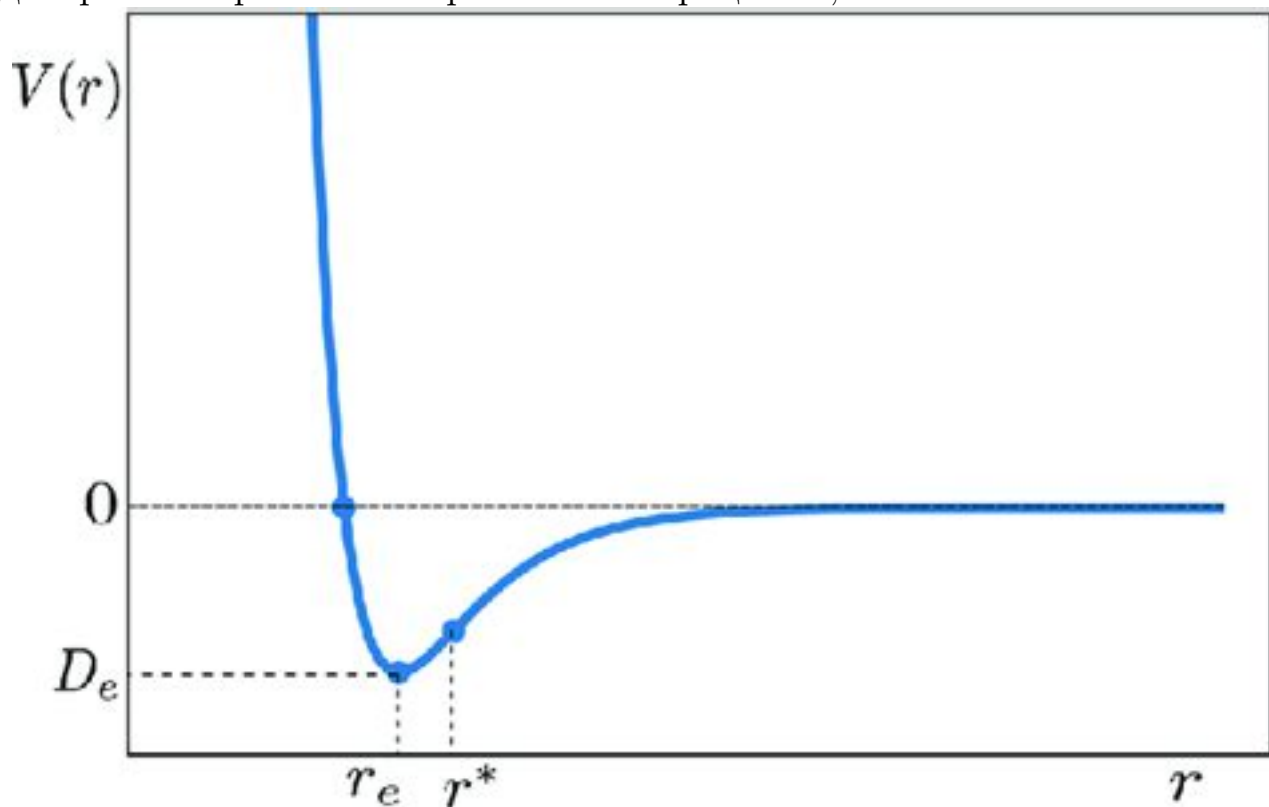


Рис. 2 — График потенциала Морзе

2.4. Ovito

Для визуализации результата наиболее целесообразным выбором будет воспользоваться уже созданной и отлаженной программой.

Ovito (Open Visualization Tool) — это программный пакет, предназначенный для визуализации, анализа и обработки данных моделирования молекулярной динамики. Он в основном используется исследователями и учеными в области материаловедения, химии и физики.

Одной из основных особенностей Ovito является его способность обрабатывать большие наборы данных моделирования на основе частиц,

в частности, моделирования молекулярной динамики. Он поддерживает различные форматы файлов, включая XYZ, LAMMPS dump, GSD и VTK. В своей работе мы будем использовать файлы с расширением dump для выходных данных, так как это расширение является широко используемым в среде моделирования физических систем.

Ovito предоставляет широкий спектр инструментов визуализации, включая визуализацию частиц, связей и поверхностей, а также возможность создания анимации и моментальных снимков траекторий симуляции. Он имеет интуитивно понятный пользовательский интерфейс, обширный набор функций и совместим с несколькими форматами файлов, что делает его ценным ресурсом для всех, кто работает с моделированием на основе частиц.

3. Реализация

3.1. Формулы и вычисления

Все необходимые законы, по которым будут двигаться молекулы, мы уже определили. Однако для того, чтобы применить формулы потенциалов Леннарда-Джонса и Морзе, необходимо их продифференцировать. Это нужно сделать для того, чтобы в результате вычисления этих формул мы получили искомое значение силы. [4]

Дифференцируем формулу потенциала Леннарда-Джонса, в результате получим:

$$|F_{LJ}(R)| = 48\epsilon \left[\frac{\sigma^{12}}{R^{13}} - \frac{\sigma^6}{R^7} \right]$$

Аналогично мы дифференцируем потенциал Морзе:

$$|F_M(R)| = \epsilon \alpha e^{\alpha(\sigma-R)}$$

Найденные выражения теперь можно использовать для расчётов. Однако для реализации метода молекулярной динамики, проходящего в декартовом пространстве, необходимо дополнительно разделить эту силу на направляющие вектора. [7] Для этого была получена следующая формула:

$$F(r) = -\frac{\bar{x}x + \bar{y}y + \bar{z}z}{r}(F_{LJ/M}(r))$$
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$F(r)$ — потенциальная энергия в векторном виде;

r — расстояние между молекулами;

Для “эволюции” системы во времени напомним функцию интегрирования. Она заключается в применении вычисленных значений силы при помощи второго закона Ньютона к позициям молекул и вычисления их новых значений скорости.

3.2. Начальные данные и хранение

Все необходимые начальные данные и константы хранятся в отдельном файле `Data.py` в виде кортежа.

Листинг 1: Содержание файла `Data.py`. Параметры и начальные условия, на которых будет запущена программа.

```
paramsAndConditions = {  
    'AgRadius': 106e-3,  
    'AgMass': 6.63352599E-26,  
    'AgEpsilon': 0.00801,  
    'AgSigma': 3.54,  
  
    'AlNumOfAtoms': 10,  
    'AlRadius': 121e-3,  
    'AlMass': 4.48038654E-26,  
    'AlEpsilon': 0.03917,  
    'AlSigma': 2.83,  
    'AlEps': 0.27,  
    'AlAlpha': 1.16,  
  
    'TimeStep': 1e-16,  
    'Steps': 100,  
    'OutputFrequency': 1,  
    'Borders': ((0, 4), (0, 4), (0, 4)),  
    'OutputFileName': 'output.dump'  
}
```

Хранение же матриц со значениями позиций, скоростей и масс молекул осуществляется при помощи пакета *numpy*, в виде *numpy.array*. Такой метод хранения позволяет в упрощённой форме проводить операции с матрицами.

3.3. Вывод результатов в файл

Формат файла вывода мы определили как *.dump*. В его структуру входит заголовок и непосредственно данные. Начало каждого шага начинается заголовком, содержащим всю необходимую информацию: шаг системы, число молекул, описание содержания тела. Тело файла содержит значение радиуса, позицию и скорость молекулы. Пакет *numpy* и здесь оказывает помощь, позволяя сформировать выводной текст из нескольких матриц для записи его в файл.

Этот файл без труда визуализируется программой Ovito. Результат можно увидеть на изображении ниже:

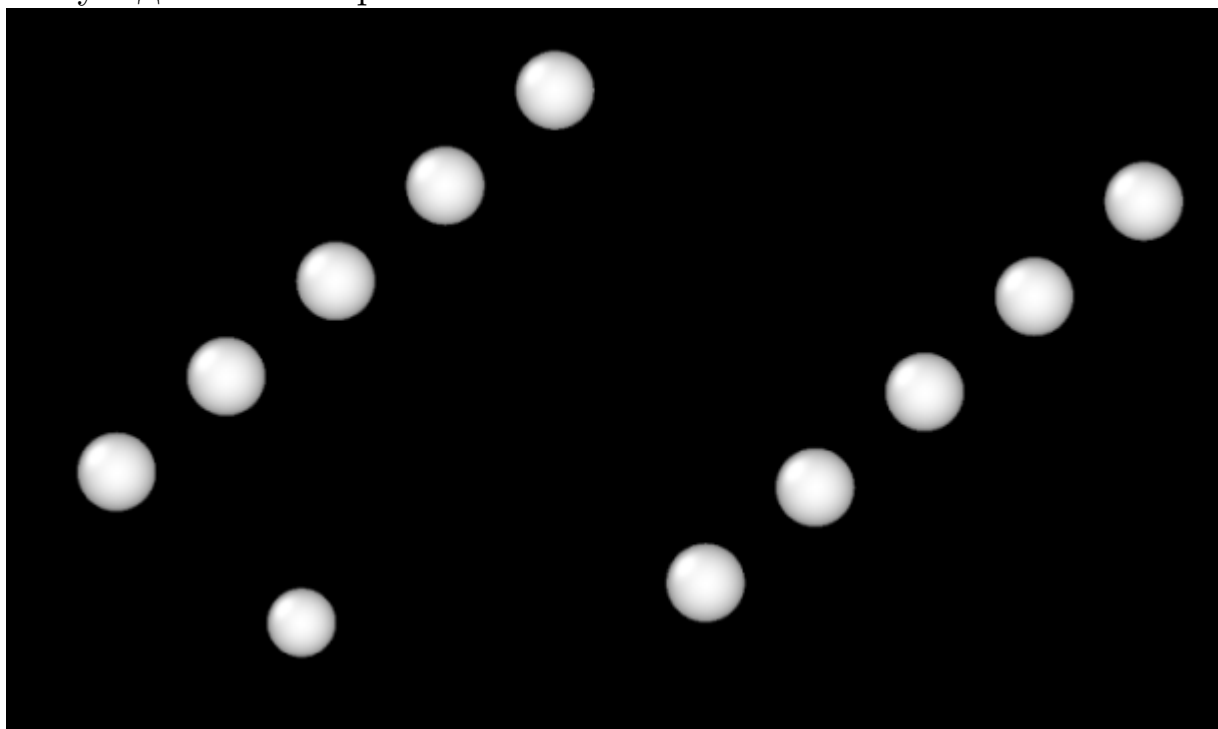


Рис. 3 — Визуализация работы программы

Заключение

В результате практической работы за осенний семестр были выполнены следующие задачи:

- Разработаны формулы движения молекул газа и металла.
- Реализован метод применения формул к позициям молекул.
- Реализован выходной файл с данными о позициях молекул на каждом шаге.

Репозиторий с проектом доступен на GitHub. [6]

Список литературы

- [1] Duc Nguyen, Hiep Trinh, Thu Nguyen. Determination Morse Potential Parameters by the Theoretical Method in EXAFS. — 2021. — 02.
- [2] Ju L. Basic molecular dynamics: Department of Materials Science and Engineering USA, Columbus: Ohio State University. <http://li.mit.edu/A/Papers/05/Li05-2.8.pdf>.
- [3] Rapaport D. C. [The Art of Molecular Dynamics Simulation](#). — 2 edition. — Cambridge University Press, 2004.
- [4] Н.Н. Меркулова, М.Д. Михайлов Разностные схемы для обыкновенных дифференциальных уравнений Томск: НИ ТГУ, 2014. https://old.math.tsu.ru/EEResources/pdf_common/difference_schemes_theory_2014.pdf.
- [5] Неелов И.М. Введение в молекулярное моделирование биополимеров. СПб: НИУ ИТМО, 2014. <https://books.ifmo.ru/file/pdf/2363.pdf>.
- [6] Репозиторий проекта на GitHub. https://github.com/NikitaSPBU/Molecules_Interaction.
- [7] Ю. В. Клунникова Моделирование физических процессов методом молекулярной динамики. Ростов-на-Дону; Таганрог: Южный федеральный университет, 2021.