

软件帮助手册

目录

1. 理论简介	3
1.1. 物理原理	3
1.1.1. 傅里叶热传导定律	3
1.1.2. 系综理论	4
1.1.3. 牛顿第二定律	5
1.1.4. 晶体缺陷	6
1.2. 模拟理论基础	8
1.2.1. 分子动力学	8
1.2.2. 周期性边界	8
1.2.3. 原子间相互作用势	9
1.2.4. 非平衡分子动力学	11
2. 理论技术实现	12
2.1. 原子间相互作用力的计算	12
2.2. 非平衡分子动力学模拟的实现	13
2.3. 声子态密度的计算	14
2.4. Wigner-Seitz 缺陷分析	14
2.5. 各类型系综实现	15
2.5.1. NVE 系综	16
2.5.2. NVT 系综	16
3. 仿真/模拟程序设计流程及使用方法	17
3.1. 仿真/模拟程序设计流程	17
3.2. 相关参数设置要求	17
3.3. 仿真/模拟程序运行配置要求	18
3.4. 使用方法	19
3.4.1 示例	19
3.4.2 结果分析	21
4. 总结与展望	23
4.1 总结	23
4.2 展望	24

1. 理论简介

1.1. 物理原理

1.1.1. 傅里叶热传导定律

傅里叶热传导定律（Fourier's Law of Heat Conduction）是描述热传导过程中的基本定律之一。它由法国数学家和物理学家约瑟夫·傅里叶（Joseph Fourier）在 1822 年提出。傅里叶热传导定律描述了在稳态条件下热量通过物质传导的过程。其数学表达式为：

$$q = -\kappa \nabla T$$

其中：

q ——热流密度，单位是瓦特每平方米（ W/m^2 ），表示单位面积上单位时间内传递的热量。

κ ——导热系数（或热导率），单位是瓦特每米每开尔文（ $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ ），表示材料传导热量的能力。在本团队开发的仿真/模拟程序中，可计算单种核材料的热导率，也可计算两种核材料间的界面热导

∇T ——温度梯度，表示温度随空间位置的变化率，单位是开尔文每米（ K/m ）。在本团队开发的仿真/模拟程序中 $\nabla T = \frac{\partial T}{\partial x}$ 即核材料 x 轴方向上的温度梯度。

傅里叶热传导定律的物理意义可以描述为：热量总是从高温区传向低温区，热流密度与温度梯度成正比，并且方向与温度梯度的方向相反。

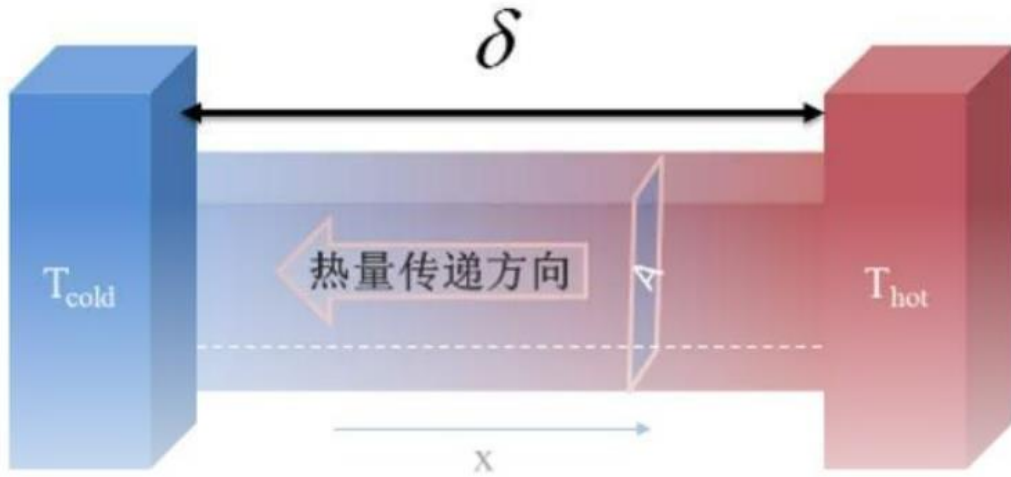


图 2 核材料热传导过程概念图

1.1.2. 系综理论

系综理论是平衡态统计物理的普遍理论，其可被应用于研究相互作用粒子组成的系统。根据经典力学，系统任一时刻的微观运动状态由 f 个广义坐标 q_1, q_2, \dots, q_f 及与其共轭的 f 个广义动量 p_1, p_2, \dots, p_f 在该时刻的数值确定。以 $q_1, q_2, \dots, q_f; p_1, p_2, \dots, p_f$ 共 $2f$ 个变量为直角坐标构成一个 $2f$ 维空间，称为相空间或 Γ 空间。系统在某一时刻的运动状态 $q_1, q_2, \dots, q_f; p_1, p_2, \dots, p_f$ 可用相空间中的一点表示，成为系统运动状态的代表点。系统的运动状态随时间而变，遵从哈密顿正则方程：

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f$$

其中 H 是系统的哈密顿量，此时可给出系统一定的宏观条件，系综就是指在此宏观条件下系统可能出现的所有微观状态的集合。

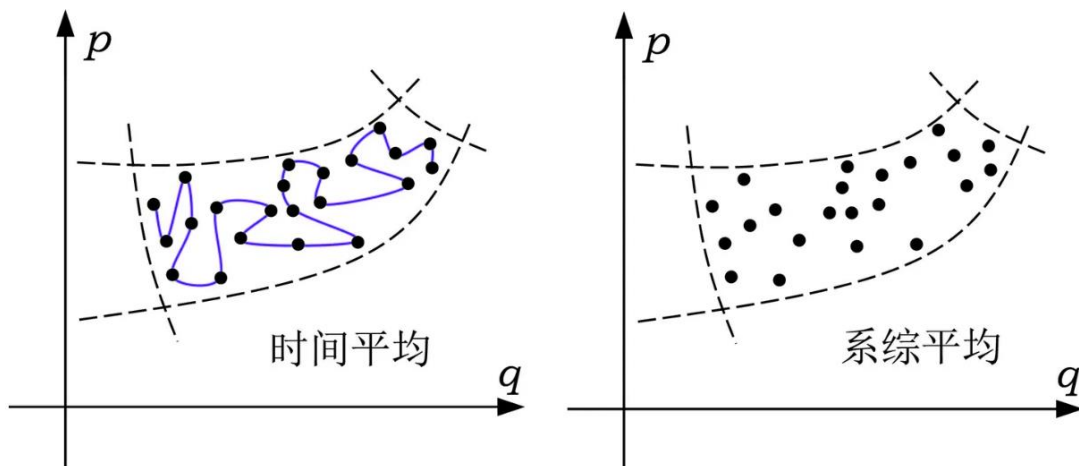


图3 相空间中的时间平均与系综平均。虚线代表相点运动的范围，实线为相点在相空间中的运动轨迹。

微正则系综（NVE 系综）

微正则系综描述的是一个在能量 E 、体积 V 和粒子数 N 恒定的孤立系统。在这种系综中，所有具有相同能量的微观状态被认为是等概率的。微正则系综中的状态数量由相空间体积来衡量，特别是能量在 E 到 δE 范围内的相空间体积。这个体积用来表示具有指定能量的微观状态数目。微观状态数 $\Omega(E, V, N)$ 表示系统在能量 E 处的可访问微观状态的总数。态密度 $\rho(E)$ 是单位能量间隔内的微观状态数，定义为：

$$\rho(E) = \frac{\partial \Omega(E, V, N)}{\partial E}$$

正则系综（NVT 系综）

正则系综描述的是一个在温度 T 、体积 V 和粒子数 N 恒定的系统，此系统可想象为与一个大热源存在热接触，二者可交换能量，因热源很大因此交换能量时可近似看作温度不变，当二者达到热平衡时，系统将与热源具有相同的温度。系统与热源合起来构成一个复合系统，这个复合系统是一个孤立系统，具有确定的能量，因此正则系综的统计描述本质上和微正则系综基本一致。

1.1.3. 牛顿第二定律

牛顿第二运动定律的常见表述是：物体加速度的大小跟作用力成正比，跟

物体的质量成反比，且与物体质量的倒数成正比；加速度的方向跟作用力的方向相同。该定律是由艾萨克-牛顿在 1687 年于《自然哲学的数学原理》一书中提出的。牛顿第二运动定律和第一、第三定律共同组成了牛顿运动定律，阐述了经典力学中基本的运动规律。其数学表达式为：

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{p}}{dt}$$

其中：

\vec{F} ——作用力，单位是牛顿 N

m ——质量，单位是 kg

\vec{p} ——动量，单位是 $kg \cdot m/s$

1.1.4. 晶体缺陷

晶体缺陷是指晶体内部结构完整性受到破坏的所在位置。在理想完整的晶体中，原子按一定的次序严格的处在空间有规则的、周期性的格点上。然而，由于晶体形成条件、原子的热运动以及其它因素的影响，实际晶体中的原子排

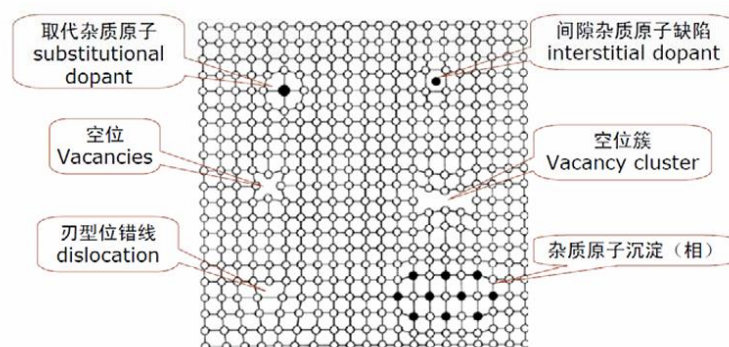


图 4 晶体中各类型缺陷示意图

列不可能如此完整和规则。因此，晶体中存在着各种缺陷，破坏了晶体的对称性。这些缺陷可以根据其延展程度分为点缺陷（空位、间隙）、线缺陷（刃位错、螺位错）、面缺陷、体缺陷等。

弗兰克尔缺陷对

弗兰克尔缺陷是指在离子晶体中，一个原子或离子从其正常的晶格位置迁

移到间隙位置，导致一个空位和一个间隙原子的形成。尽管存在这些缺陷，晶体整体仍保持电中性，因为迁移的离子并未离开晶体。这种缺陷常见于较小阳离子的晶体和高温条件下，因其能量代价较低。弗兰克尔缺陷增加了晶体中的扩散通道，提高了离子迁移率，从而影响材料的电导率和机械强度。与普通缺陷不同，这种缺陷的产生往往同时伴随一个间隙和一个空位的形成，因此通常被称为弗兰克尔（Frenkel）缺陷对。

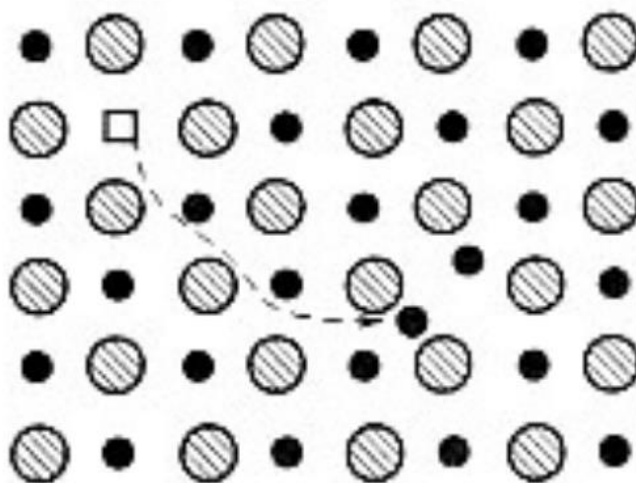


图 5 弗兰克尔缺陷对形成过程示意图

辐致缺陷

辐致缺陷（Radiation-Induced Defects）是指在材料受到高能粒子辐射（如中子、电子、离子或伽马射线）时形成的多种类型的晶体缺陷（空隙、位错、气泡等）。这些缺陷可以显著影响材料的结构和性能。根据辐照粒子和能量的不同，辐致缺陷类型可分为以下几类：

1) **中子辐射缺陷**：高能中子与原子核碰撞，产生位移原子和空位，常见于核反应堆材料中。

2) **电子辐射缺陷**：高速电子与晶体中电子和原子碰撞，主要影响半导体材料的电学性质。

3) **离子辐射缺陷**：重离子（如氦离子、氢离子）在晶体中产生深穿透和高能转移，形成复杂缺陷结构。

4) **伽马射线缺陷**：高能光子与晶体中的电子发生相互作用，导致电子激发和原子位移。

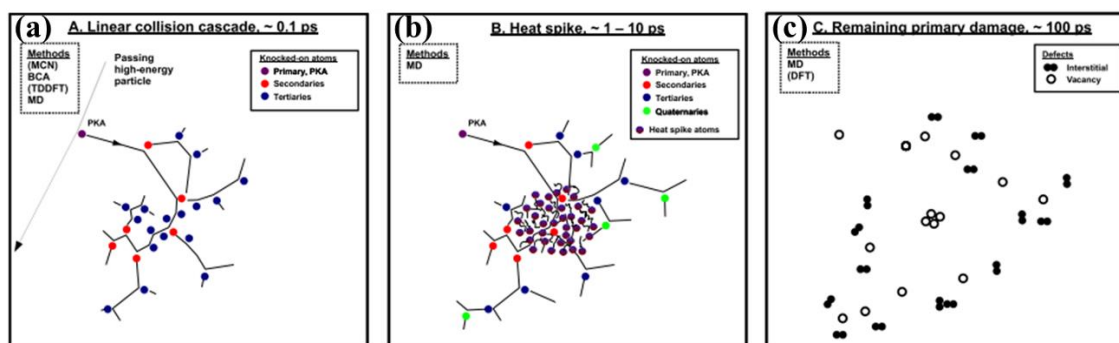


图 6 辐照环境下材料内辐致缺陷微观演化行为

辐致缺陷对晶体材料的物理、化学、机械性质均有显著影响。在某些应用中，辐致缺陷是不可避免的，例如在核反应堆和太空环境中。为了控制和减少辐致缺陷的影响，往往采取了适当的控制措施（利用晶界修复缺陷、屏蔽辐射等）

1.2. 模拟理论基础

1.2.1. 分子动力学

分子动力学是一套分子模拟方法，该方法主要是依靠计算机来模拟分子、原子体系的运动，是一种多体模拟方法。通过对分子、原子在一定时间内运动状态的模拟，从而以动态观点考察系统随时间演化的行为。通常，分子、原子的轨迹是通过数值求解牛顿力学方程得到，势能（或其对笛卡尔坐标系的一阶偏导数，即力）通常可以有分子间相互作用势函数、分子力学力场给出。对于考虑分子本身的量子效应的体系，往往采用波包近似处理或采用费恩曼路径积分表述方式处理。分子动力学也常常被采用作为研究复杂体系热力学量和其它宏观性质。分子动力学最早在 20 世纪 50 年代由物理学家提出，如今广泛应用于物理、化学、生物体系的理论研究中。

1.2.2. 周期性边界

周期性边界条件是一种常用的边界条件，用于描述物理问题中的周期性现象。首先，我们从偏微分方程的角度入手。偏微分方程描述了事物之间的相互

关系，其中 A 事物的变化会引起 B 事物的变化。如果我们假定 A 事物的时间变化与 B 事物的空间变化成正相关，我们可以写出如下形式的偏微分方程：

$$\frac{\partial A}{\partial t} = k \frac{\partial B}{\partial x}$$

这是一个典型的偏微分方程，其中的微分算子表示局域性：近处影响大速度快，远处影响小速度慢。然而，仅仅得到偏微分方程是不足够的。我们还需要定解条件来唯一确定方程的解。定解条件包括初始条件、边界条件和衔接条件。其中，周期性边界条件就是一种边界条件。

周期性边界条件的来源在于对称性。自然界中存在大量的周期性现象，因此周期性边界条件变得十分重要。例如，在晶体中，晶格存在平移不变性，我们希望在平移数个晶格之后物理场不发生变化。为了避免直接求解大量晶格，我们只需求解一个晶格内部的场，并要求这个场具有周期性边界条件，从而得到整个晶体内部的场。

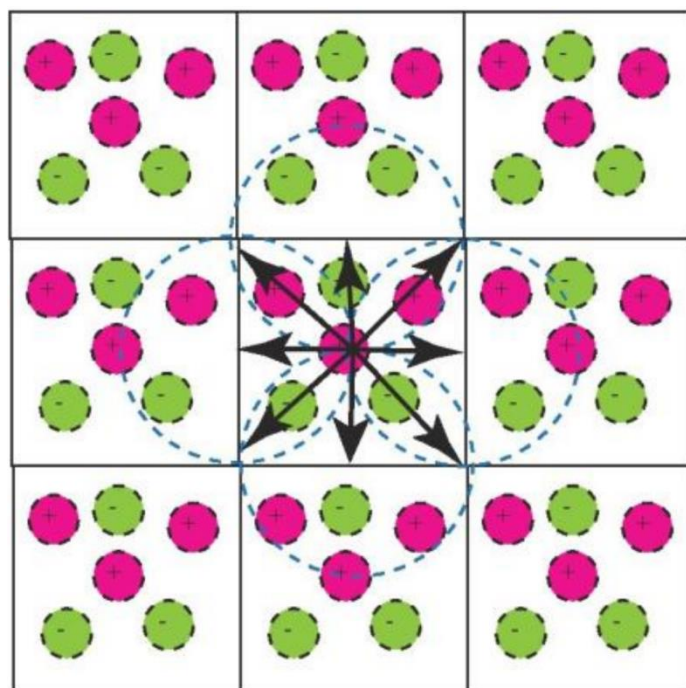


图 7 周期性边界条件在晶体研究中的应用

1.2.3. 原子间相互作用势

原子间相互作用势是描述原子之间相互作用的能量函数，决定了原子在空

间中的分布及其动力学行为。这些势函数在物理、化学和材料科学中非常重要，因为它们能够帮助我们理解和预测材料的结构、性质和行为。在分子动力学模

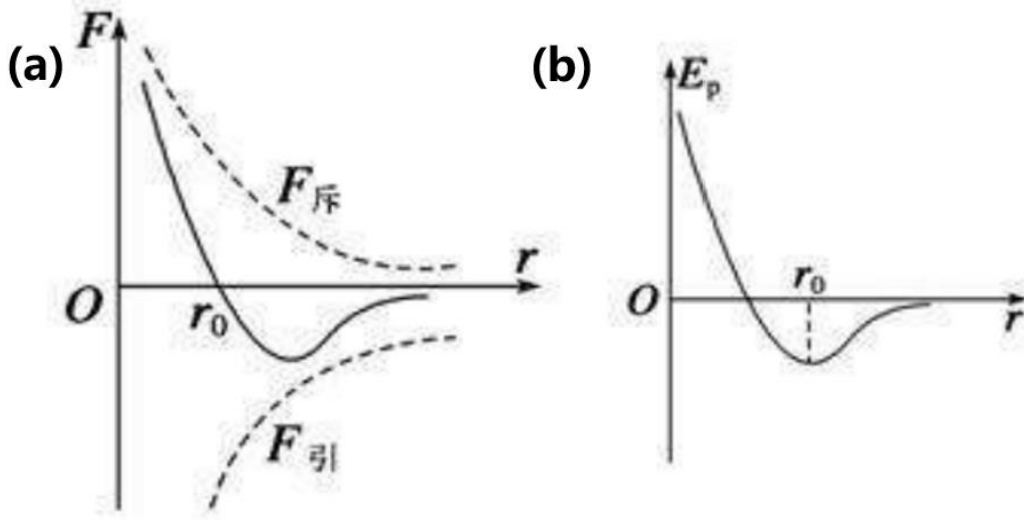


图 8 (a) L-J 势描述原子间相互作用力, (b) L-J 势描述原子间相互作用势能

拟中，势函数将告诉计算机原子间势能和相互作用力的计算方法从而方便进行下一步原子运动方程的计算。目前常见的势函数有以下几种：

1) **兰纳-琼斯势 (Lennard-Jones potential)**: 又称 L-J 势，是用来模拟两个电中性的分子或原子间相互作用势能的一个比较简单的数学模型。最早由数学家约翰·兰纳-琼斯于 1924 年提出。由于其解析形式简单而被广泛使用，特别是用来描述惰性气体分子间相互作用尤为精确。兰纳-琼斯势能以两体距离为唯一变量，包含两个参数。其形式为：

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

ϵ 等于势能井的深度， σ 是互相作用的势能正好为零时的两体距离。在实际应用中， ϵ ， σ 参数往往通过拟合已知实验数据或精确量子计算结果而确定。

2) **嵌入原子势 (embedded-atom method potentials)**: 又称 EAM 势，模拟金属体系时，可以用 L-J 势描述金属原子之间的受力，但由于 EAM 势在原子对势的基础上添加了电子云密度相关项，比单纯的对势精度更高。EAM 势的数学表达式为：

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij})$$

其中 F 是嵌入能，它是原子电子密度 ρ 的函数， ϕ 是一对势相互作用， α 和 β 是原子 I 和 J 的元素类型。EAM 势的多体性质是结果嵌入能量项。式中的两个总和都是在截止距离内原子 I 的所有邻居 J 上求和的。

3) 齐格勒-比尔萨克-利特马克势函数 (Ziegler-Biersack-Littmark potentials): 又称 ZBL 势，ZBL 势被用于描述原子之间的高能碰撞，筛选原子核斥力。距离为 r_{ij} 一对原子间的势能由下式给出：

$$E_i^{ZBL} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} \phi\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) + S(r_{ij})$$

$$a = \frac{0.4685}{Z_i^{0.23} + Z_j^{0.23}}$$

$$\begin{aligned} \phi(x) = & 0.18175e^{-3.1998x} + 0.50986e^{-0.94229x} + 0.28022e^{-0.4029x} \\ & + 0.02817e^{-0.20162x} \end{aligned}$$

其中 e 是电子电荷， ϵ_0 是真空介电常数， $Z_i^{0.23}$ 和 $Z_i^{0.26}$ 是两个原子的核电荷， ϕ 是一对势相互作用。

ZBL 势在研究离子束与材料相互作用、分子动力学模拟和离子注入过程等领域中广泛应用。ZBL 势是经验势函数，通过实验数据和理论计算得到，其表达式能够准确地描述原子在很短距离内的强烈排斥作用。

1.2.4. 非平衡分子动力学

非平衡分子动力学模拟 (NEMD) 是分子动力学模拟的一种方法，用于研究系统在远离热力学平衡状态下的行为。这种方法特别适用于模拟和研究物质在外界驱动力作用下的动态过程，如流动、传热和剪切变形。非平衡分子动力学模拟基于牛顿运动方程，通过数值求解这些方程来描述粒子的时间演化。与

平衡态分子动力学不同，NEMD 引入外界驱动力或边界条件，使系统处于非平衡状态，常见的外界驱动力包括：

- 1) **外加电场**：用于模拟电导率和电流传输；
- 2) **剪切力**：用于研究材料的力学性质；
- 3) **温度梯度**：用于模拟热导率和热输运。其中本教学资源即通过在晶体中添加热流的方法模拟热输运过程。

2. 理论技术实现

2.1. 原子间相互作用力的计算

由于嵌入原子（EAM）势在模拟金属的原子间相互作用时考虑了原子在其周围原子环境中的嵌入能量，这使得它比简单的两体势模型更能准确地描述金属的物理特性，因此本仿真/模拟程序计算原子间相互作用时选择了 EAM 势。其数学表达式为：

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij})$$

本仿真/模拟程序采用 Zhou 势函数拟合程序，以拟合各金属元素所适合的势函数，并将结果记录在相应的.eam.alloy 文件中。文件中包含了各金属元素的嵌入能量 F 、原子电子密度 ρ 、以及对势相互作用 ϕ 随两原子间距 r 变化的数值。通过计算两原子间的距离，并查找相应的函数值，可以计算出两原子间的势能。接着，通过公式：

$$\vec{F} = \nabla E$$

计算出两原子间的相互作用力，从而代入牛顿力学方程，解出原子的运动轨迹，进而描述系统的状态。

2.2. 非平衡分子动力学模拟的实现

Jund 方法：该方法通过在热区增加和冷区减少一样的能量(总能不变),在两端造成了温度差,从而形成温度梯度.能量的修改是通过缩放冷区和热区中原子的速率实现的.对于热区和冷区中的任一原子 i ,其速率可以通过下面的式子修改(可以证明交换前后系统总动量不变):

$$v'_i = v_{c-m} + \alpha(v_i - v_{c-m})$$

式中 v_{c-m} 为质心速率, 定义为:

$$v_{c-m} = \frac{\sum_i m_i v_i}{\sum_i m_i}$$

α 为速率的缩放系数, 定义为:

$$\alpha = \sqrt{1 \pm \Delta\varepsilon/E_k^R}$$

其中的正负号分别代表了热区和冷区的缩放系数, $\Delta\varepsilon$ 为在热区和冷区中加入和抽出的能量, 为常数, 并且是人为给定的. 式中的 E_k^R 为区块中所有粒子相对于质心的动能总和, 定义为:

$$E_k^R = \frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2 - \frac{1}{2} \sum_i m_i v_{c-m}^2$$

一旦给定了 $\Delta\varepsilon$, 热流密度也是给定的:

$$J = \frac{\Delta\varepsilon}{2At}$$

通过不断更新热源热汇处原子速度, 并通过不断步进是热量在热源和热汇间传递从而实现非平衡分子动力学热输运模拟。

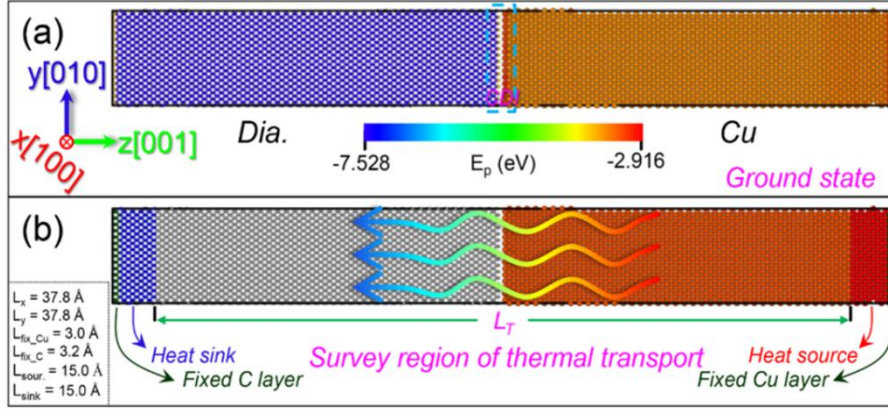


图 9 非平衡分子动力学模拟示意图

2.3. 声子态密度的计算

声子态密度（PDOS）是描述晶体中声子（即晶格振动的量子化形式）在不同能量或频率下分布的一个重要物理量。它反映了每单位频率范围内声子的数量，是研究材料热力学性质和热输运性质的重要工具。基于分子动力学模拟，声子态密度可以通过对速度自关联函数（VACF）进行傅里叶变换得到：

$$PDOS(\omega) = \int \frac{\langle \sum_i v_i(t_0) \cdot v_i(t_0 + t) \rangle}{\langle \sum_i v_i(t_0) \cdot v_i(t_0) \rangle} e^{-2\pi i \omega t} dt$$

其中 t_0 是不同的起始时间， t 是关联时间， v_i 是第 i 个原子的速度值， ω 为频率。

在进行非平衡分子动力学模拟后，程序将模拟过程中记录的原子速度值代入相关公式，以计算得到声子态密度。

2.4. Wigner-Seitz 缺陷分析

Wigner-Seitz 缺陷分析是一种用于分析晶体材料中缺陷的方法。该方法基于 Wigner-Seitz 原胞的概念，用于确定原子或离子在晶格中的位置及其偏离理想位置的程。以下是 Wigner-Seitz 缺陷分析的具体实现过程：

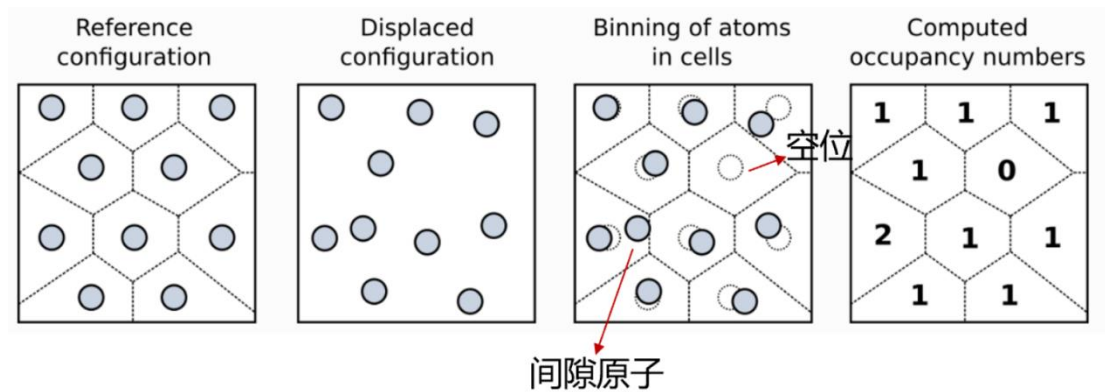


图 9 Wigner-Seitz 缺陷分析原理示意图

1) Wigner-Seitz 原胞的定义: Wigner-Seitz 原胞是围绕每个晶格点构建的一个体积单元, 包含了所有与该晶格点距离最近的空间点。通常, 通过连接晶格点到其最近邻居的中垂线形成的多面体即为 Wigner-Seitz 原胞。

2) 构建 Wigner-Seitz 原胞: 首先, 从每个原子或离子出发, 连接到其最近的邻居, 形成所有连接线的中垂面。这些中垂面围绕每个晶格点形成一个封闭的多面体, 这个多面体即为 Wigner-Seitz 原胞。

3) 分析原子位置: 在进行缺陷分析时, 通过比较实际的原子位置与理想晶格中的位置, 可以确定哪些原子偏离了其理想位置。这些偏离可以反映出晶体中的缺陷, 例如空位、间隙原子或置换原子。

4) 确定缺陷类型: 根据原子位置的偏离程度和方向, 可以进一步分析缺陷的类型。例如, 如果一个原子的位置在其 Wigner-Seitz 原胞的边界附近或之外, 可能意味着存在一个空位或间隙原子。如果原子位于其他原子的 Wigner-Seitz 原胞内, 则可能意味着存在置换缺陷。

5) 计算和分析: 通过统计和分析所有原子的偏离情况, 可以得到晶体中缺陷的分布、类型和浓度。

2.5. 各类型系综实现

本仿真/模拟程序通过计算系统的宏观性质并控制其改变, 从而实现各类型系综。以下将详细介绍各类型系综的具体实现方法。

2.5.1. NVE 系综

NVE 系综描述的是能量 E 、体积 V 和粒子数 N 恒定的孤立系统。为了确保这些宏观量不变，我们在空间中创建了一个固定大小的盒子，并在盒子内建立体系，以保证体积 V 的恒定。此外，空间中的原子仅受原子间的相互作用力影响。为避免粒子与盒子壁的相互作用，我们采用了周期性边界条件，从而排除了边界效应。同时，系统没有能量的输入或输出，从而保证了总能量 E 的不变。

在上述条件下，我们使用嵌入原子方法（EAM）势函数来计算原子间的相互作用力。然后，通过解牛顿力学方程，对原子的运动状态进行迭代更新。这一过程使得我们能够模拟 NVE 系综下的原子运动和系统演化。

2.5.2. NVT 系综

正则系综描述的是一个在温度 T 、体积 V 和粒子数 N 恒定的系统。为了确保体积 V 和粒子数 N 恒定，我们同样在空间中创建了一个固定大小的盒子，并在盒子内建立体系，为避免粒子与盒子壁的相互作用，我们采用了周期性边界条件，从而排除了边界效应。

为了保证 T 的恒定，我们需要采用 Berendsen 热浴法，如果采用比例系数法调控温度，调整温度前后的温差为：

$$\Delta T = T_{set} - T = \lambda^2 T - T = (\lambda^2 - 1)T$$

其中 T_{set} 为设定的温度， T 为当前系统温度， λ^2 为二者的比例系数。

但是，如果在 MD 模拟中每步都把体系的温度调整到设定温度，限制了由多种物理化学过程引起的模拟体系温度的自然波动，反而导致模拟体系温度变化的不稳定，不利于体系达到平衡。因此 Berendsen 提出了一个可以类比实验控温方法的温度调算法，使模拟体系与一个具有模拟设定温度的恒温热浴耦合，以达到控制温度的目的。具体是，当体系温度超过热浴温度时，体系向热浴释放热量；当体系温度低于热浴温度时，体系从热浴得到热量。模拟体系与热浴间的热量交换速度，分别与模拟体系和热浴之间的温差成正比。

$$T(t) = T_{bath} + (T(0) - T_{bath})e^{\frac{-t}{\tau_T}}$$

式中， τ_T 为模拟系统与热浴之间的耦合时间，表示模拟系统恢复到热浴温度所需的平均时间。耦合时间 τ_T 越长，模拟系统与热浴之间的耦合越弱，恢复温度的速度越慢；耦合时间 τ_T 越短，模拟系统与热浴之间的耦合越强，恢复温度的速度越快。如果耦合时间等于时间步长，则 Berendsen 热浴算法与比例系数法一致。

3. 仿真/模拟程序设计流程及使用方法

3.1. 仿真/模拟程序设计流程

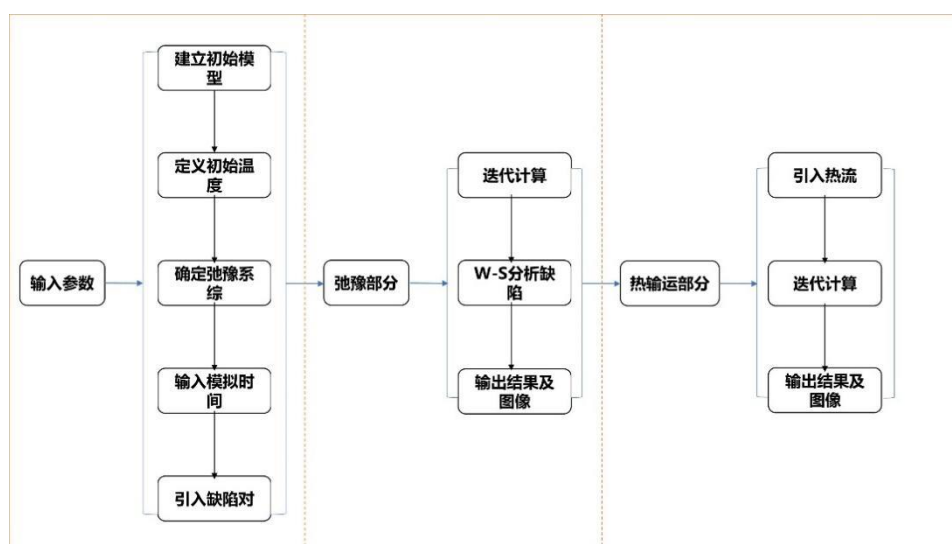


图 10 仿真/模拟程序使用流程

3.2. 相关参数设置要求

参数	定义	单位	设置范围
元素种类	体系所用元素	无	常见的核反应堆元素
x	x 方向晶格数量	无	建议 10~20
y	y 方向晶格数量	无	建议 5~10

z	z 方向晶格数量	无	建议 5~10
T ₀	体系初始温度	K	100~500
系综	体系模拟系统的集合	无	NVE/NVT
Time	体系弛豫时间	ps	0.5~2
T_chunk	体系引入热流大小	W/m ²	1~20
缺陷对数	体系引入 Frenkel 缺陷对数目	无	1~20

3.3. 仿真/模拟程序运行配置要求

设备	型号
操作系统	Windows 8 以上
CPU	Intel Core i3-530 及以上
GPU	NVIDIA GeForce 9600GT 及以上
内存	2G 以上
硬盘空间	2G 以上
运行资源	Numpy、Matplotlib、PySide6 等库
运行环境	Python3.0 以上

3.4. 使用方法

3.4.1 示例

本软件具有简单、方便的特点，学生和教师在使用本软件过程中可以极快的上手。以教师的教学为例。

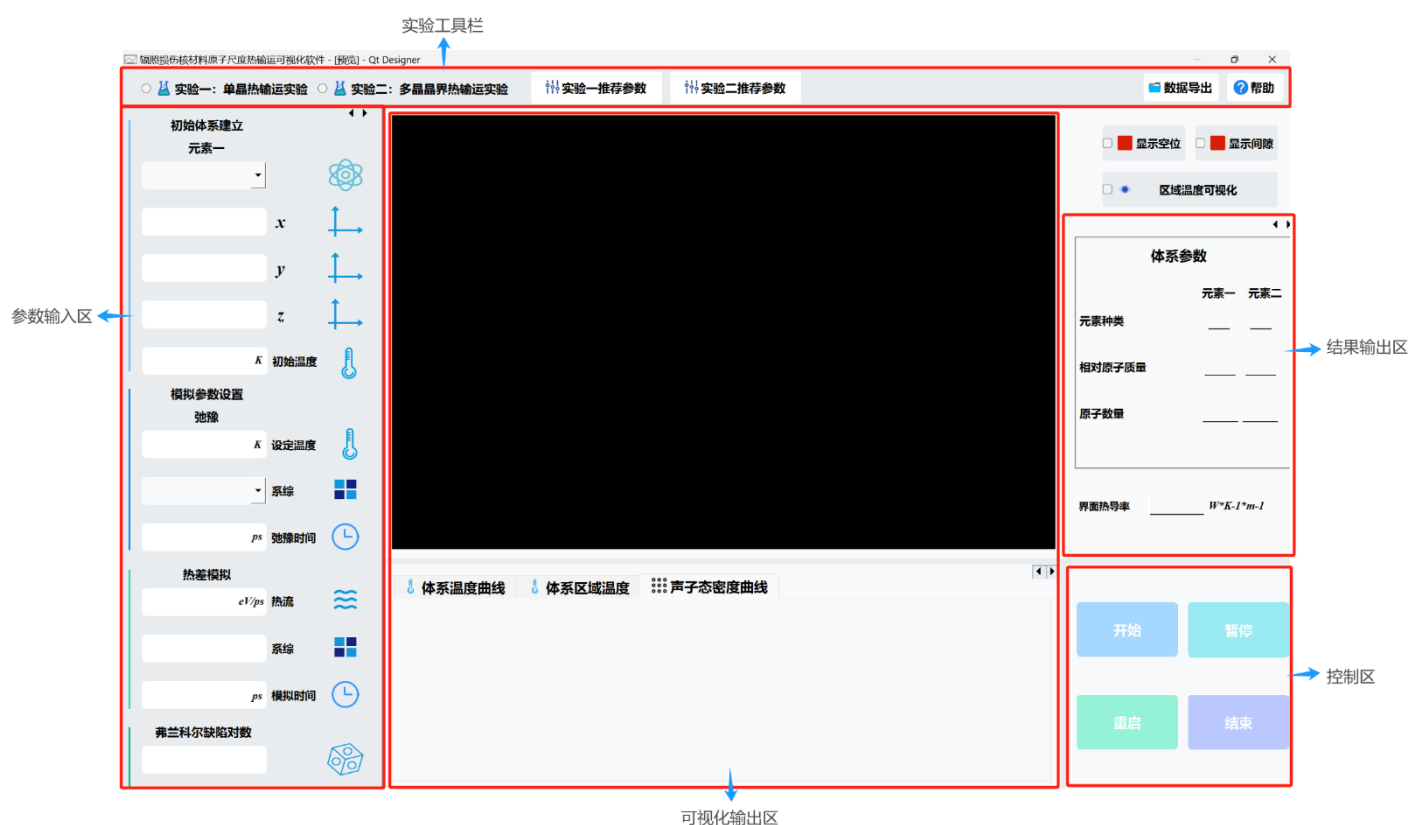


图 11 软件界面

在实际使用过程中，教师首先应进行各项参数的输入。在体系建立区中可以根据实际教学需要自定义输入参数。在元素种类部分可以选择一至两种常见的金属元素；体系大小部分可以输入所需建立体系的各方向晶格数；弛豫部分可以输入弛豫初始温度及弛豫过程系综，还可以输入 NVT 系综下的设定温度和总弛豫时间；热差模拟部分可以输入引入热流大小、热差模拟过程弛豫过程系综及弛豫总时间；辐照模拟部分可以输入引入 Frenkel 缺陷对数目，详见图 12。总体上来说将本软件分为初始体系建立、弛豫模拟参数设置、热差模拟参数设置及辐照模拟设置四个部分。



图 12 软件输入区示意图

除了上述的自定义输入参数以外，为了方便初学者使用的方便，还提供了推荐参数这一选项，并依据所选择的实验分为推荐参数一与推荐参数二两种选项。以推荐参数一为例，这里选择初始体系建立元素为 Cu 元素，晶格数设置为 $100 \times 4 \times 4$ ，初始温度为 300K，设定温度为 300K，弛豫系统为 NVT，弛豫时间为 10ps，热差模拟引入热流为 1.64eV/ps，热差模拟弛豫系统为 NVE，弛豫时间为 25ps。

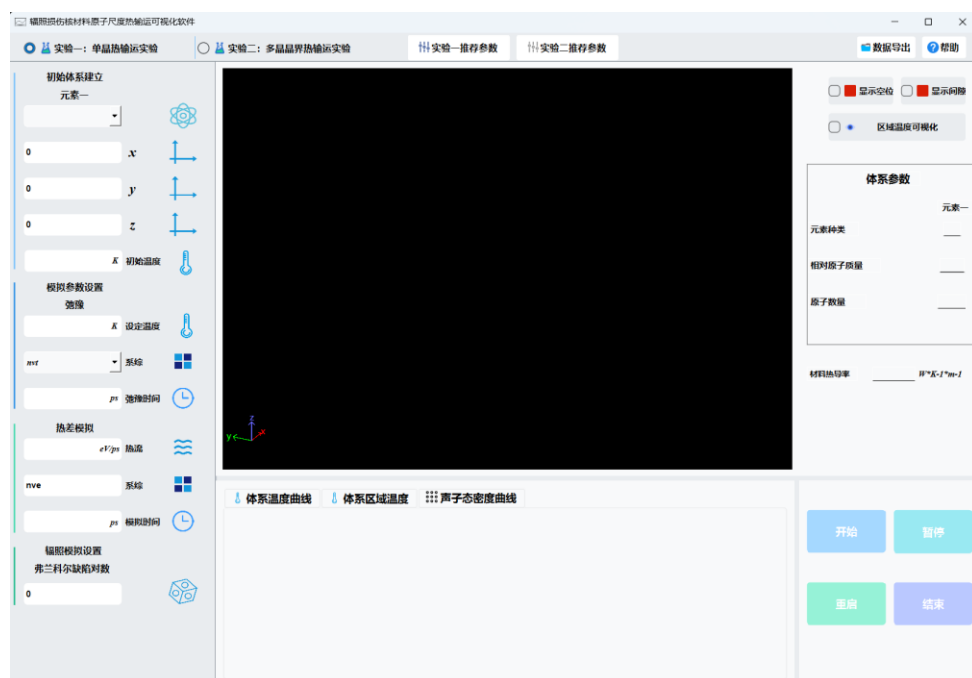


图 13 参数填写效果

参数输入区输入参数完毕后，点击开始按钮，在软件三维坐标图区域和体系参数区首先能够看到建立的体系初始坐标图和体系的基本参数如所选元素种类、相对原子质量、原子数量。

点击开始按钮后软件开始进行计算。在计算过程中本软件还提供了暂停、重启及结束功能，可以方便学生了解任意时刻的原子坐标图及体系的各项结果曲线图（如图 14）。教师可以根据计算过程与计算完成后输出的结果图来讲解本节课的内容。学生们也可以根据自身需要自行操作本软件，观察最终计算结果。

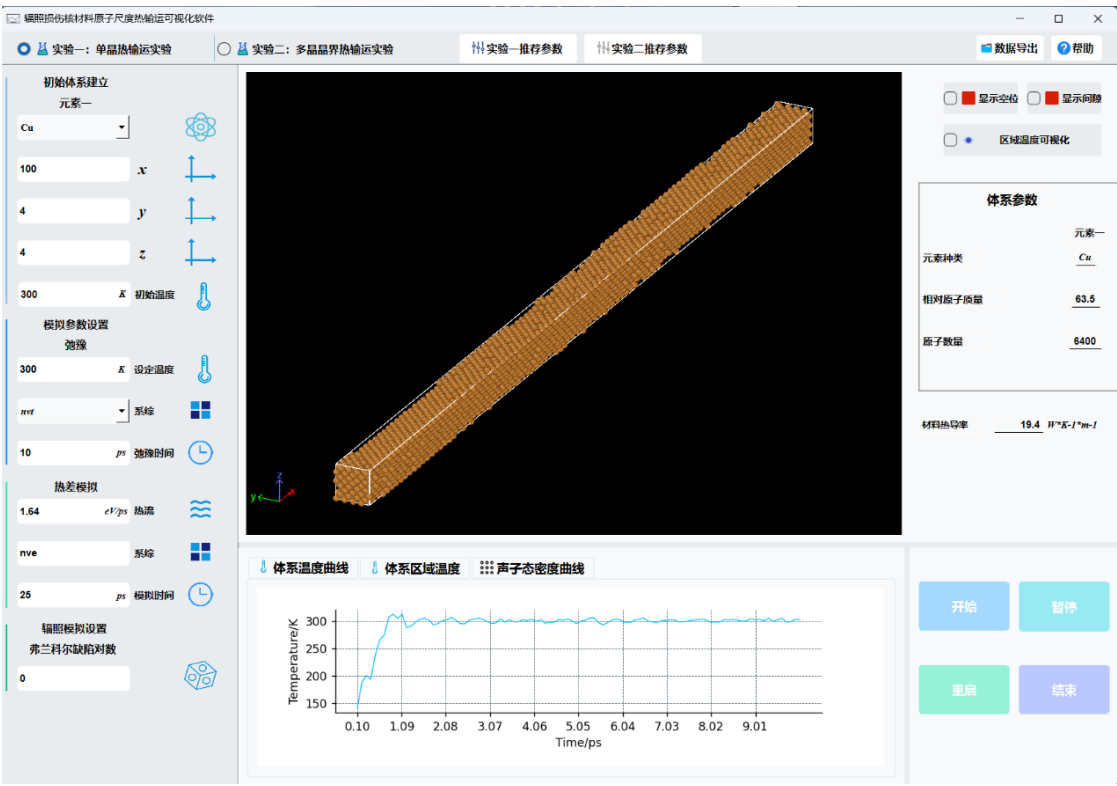


图 14 体系运行结果

本软件使用方法简单、可操作性强、结果直观，能够激发学生进一步了解、学习和探究相关内容的兴趣。

3.4.2 结果分析

在选用 NVT 系综弛豫下，体系温度会从初始温度经过一段时间后缓慢上升或下降到设定温度后保持不变；在选用 NVE 系综弛豫下，体系温度会在初始温度附近呈现波动状，这两种情况在整体趋势方面均与实际相符。在引入适量的

Frenkel 缺陷对并弛豫一段时间后，可以通过点击显示空位、显示间隙按钮来显示体系弛豫完毕后的空位、间隙分布情况，且可通过点击区域温度可视化按钮来显示不同区域的温度。除此之外，实验一与实验二仿真过程结束后软件会分别输出三维坐标图、体系区域曲线、体系区域温度曲线、体系声子态密度曲线、体系热导率，（如图 15-16）。相比于实际情况具有一定的偏差，但各个图像的整体趋势均与实际相符。

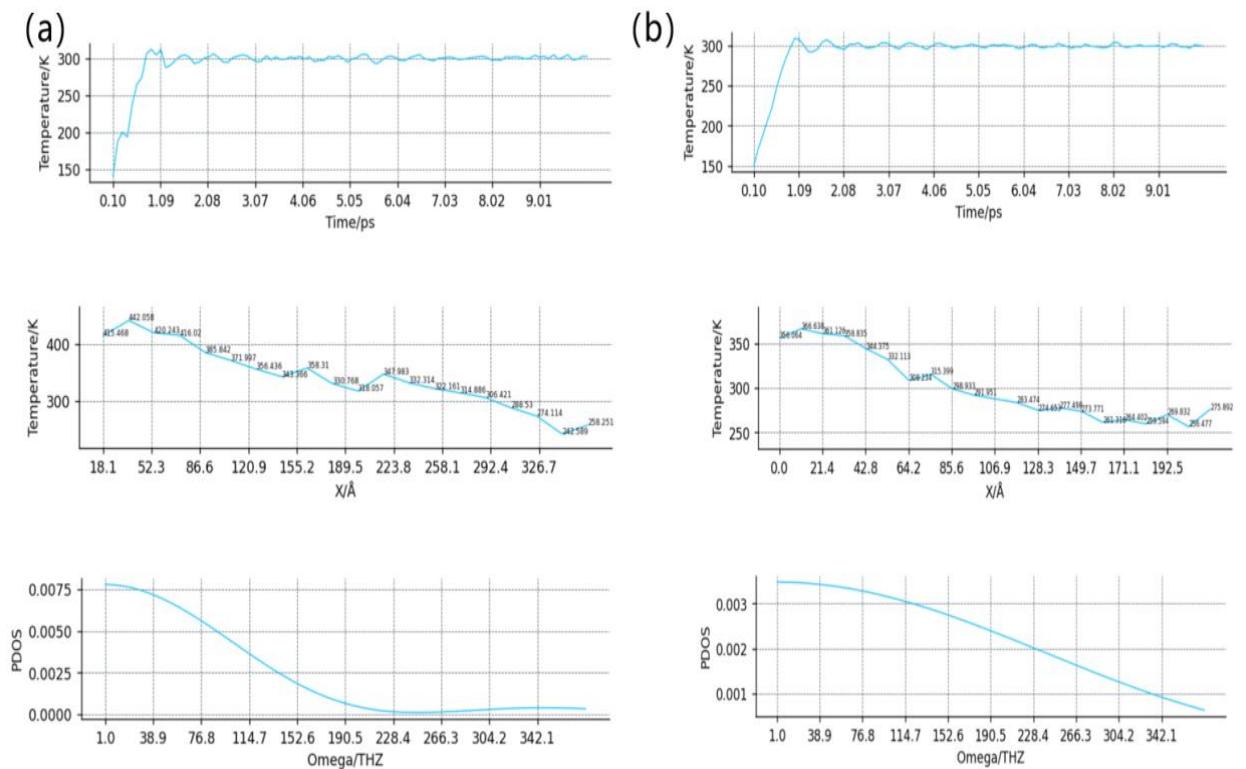


图 15 运行结果曲线图（a）单种金属晶体；（b）两种金属晶体

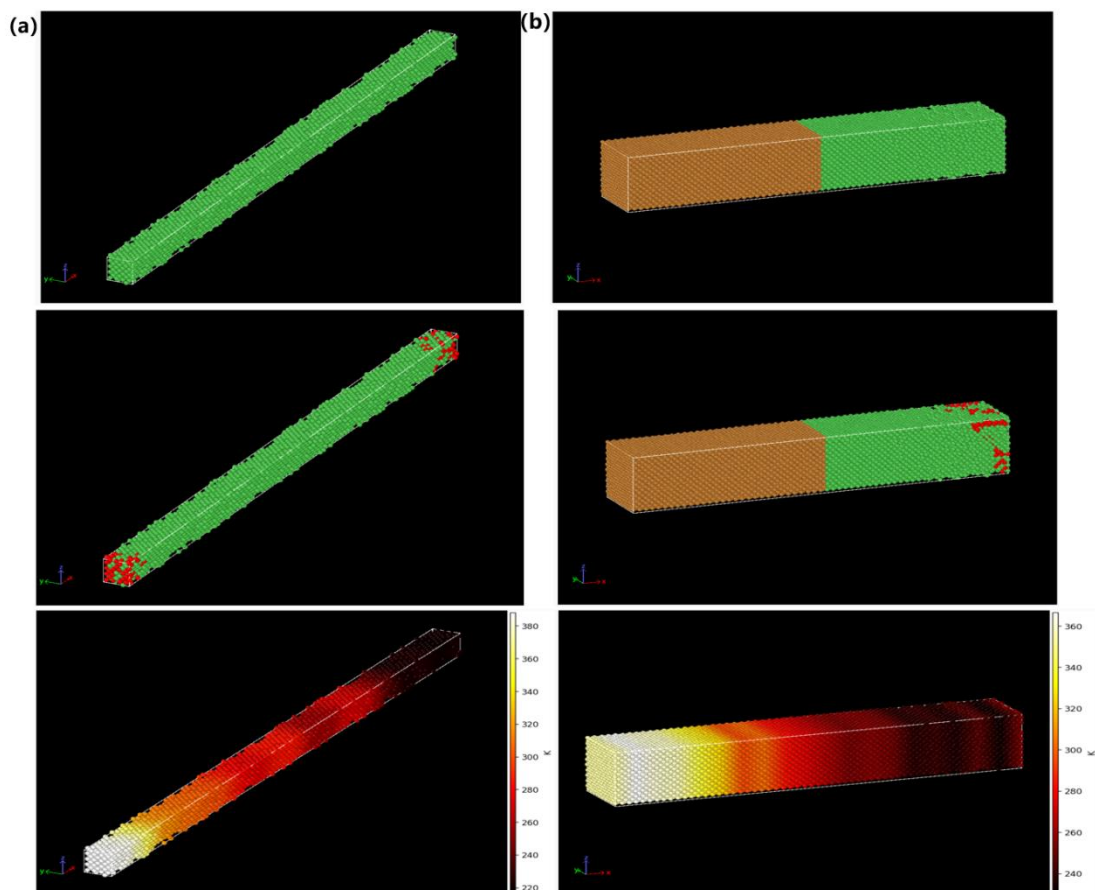


图 16 运行结果三维坐标图 (a) 单种金属晶体； (b) 两种金属晶体

4. 总结与展望

4.1 总结

本软件依赖计算机构建分子模型，通过模拟分子的微观结构机制和轨迹行为，从而得到体系的各项宏观数据。将本软件与实际教学相结合可以充分帮助学生从可视化的角度充分了解材料在强辐射场下的热输运行为，可用性较强。对比于其他的分子动力学模拟软件，本软件具有以下优点：

1. 软件使用方法简单，可操作性强。市面上其他的分子动力学软件在用于实际教学过程中常依赖终端操作存在编程要求高，使用方法复杂等不足，而学生在使用本软件过程中仅需要在参数输入区输入各项参数后即可开始模拟，操作简单且可适用范围广。

2. 软件结果直观。通过本软件计算完毕后可以直接得到相关结果图像，在

实际教学过程中清晰、直观，便于学生理解，可以有效提升课堂效率。

4.2 展望

在本软件代码编写过程中选用 EAM 势函数模拟不同元素之间的受力，但鉴于体系原子数量众多且部分代码编写过程存在反复套用循环、时间复杂度高等问题，导致软件整体计算时间长。同时与实际结果相比较后随整体趋势相符但数值方面仍存在一定的误差，存在进一步优化改进的空间。在后续的改进过程中，我们将会进一步优化弛豫、原子受力和热差模拟部分算法，降低软件计算所需时间和计算结果误差。未来我们会进一步从软件计算代码、GUI 设计美化、计算功能丰富等方面进行优化，为实际教学工作提供更多的便利。