

## РЕФЕРАТ

Целью данной работы является моделирование динамики абрикосовских вихрей в сверхпроводниках полуторного рода для сравнения результатов со сверхпроводниками первого и второго рода, поскольку существование нового типа сверхпроводимости со свойствами сверхпроводимости 1-го и 2-го рода ставится под сомнение многими учеными и исследователями. В процессе работы были проведены модельные эксперименты при помощи пакета молекулярного моделирования LAMMPS.

Ключевые слова: сверхпроводимость, вихри Абрикосова, ТГЛ, молекулярная динамика, полумейснеровское состояние, LAMMPS.

## ABSTRACT

The purpose of this work is to simulate the dynamics of Abrikosov vortices in superconductors type-1.5 for comparing the results with results for type-I and type-II superconductors. The existence of a new superconductivity type having the features of type-I and type-II superconductors questioned by many scientists and research groups. In the process were performed model experiments using the molecular modeling package LAMMPS.

Keywords: superconductivity, Abrikosov vortices, TGL, molecular dynamics, semi-Meissner state, LAMMPS.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение .....	7
1 Сверхпроводимость .....	8
1.1. Основные свойства сверхпроводимости .....	8
1.2. Теория Бардина, Купера, Шриффера .....	8
1.3. Сверхпроводимость 1-го и 2-го рода .....	9
1.4. Сверхпроводимость 1,5-го рода и двучелевые сверхпроводники .....	13
2 Молекулярное моделирование .....	18
2.1. Молекулярная динамика .....	18
2.1.1. Уравнения МД .....	18
2.1.2. Алгоритм Верле .....	19
2.1.3. Потенциалы взаимодействия .....	19
2.2. Пакеты для расчета молекулярной динамики .....	21
2.3. LAMMPS .....	24
2.4. Модельный эксперимент .....	25
Заключение .....	35
Список используемых источников .....	36
Приложение А Входной файл для LAMMPS .....	39
Приложение Б Код скрипта .....	40

## ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

В настоящей работе применяют следующие термины с соответствующими определениями:

ТГЛ – теория Гинзбурга–Ландау

ГЛ – Гинзбург–Ландау

МД – молекулярная динамика

$\lambda$  – лондоновская глубина проникновения магнитного поля

$\xi$  – длина когерентности

$\kappa$  – параметр ТГЛ

## Введение

В последнее время интерес к исследованию вихревого состояния в целом и в многокомпонентных сверхпроводниках в частности обуславливается широкими потенциальными возможностями применения сверхпроводников в современной микроэлектронике и энергетике, а также интересом к самой физике процессов в смешанном состоянии сверхпроводников. Развитие нанотехнологий и открытие новых высокотемпературных сверхпроводников стимулируют новые теоретические и экспериментальные исследования вихревого состояния сверхпроводников. Из-за этого изучение динамики вихревого состояния является **актуальным** в наше время.

**Целью работы** является проведение исследования динамики вихрей Абрикосова в сверхпроводниках 1,5-го рода при различных температурах при помощи пакета молекулярного моделирования LAMMPS и последующий анализ полученных данных.

Потенциал взаимодействия впервые был аппроксимирован функцией потенциала Морзе, что позволяет ускорить процесс вычислений не сильно теряя в их точности. Это являет собой **научную новизну** работы.

# 1 Сверхпроводимость

## 1.1 Основные свойства сверхпроводимости

Сверхпроводимость была открыта в 1911 г. в Лейдене Камерлинг-Оннесом через три года после того, как он впервые получил жидкий гелий.

Явление, которое наблюдал Камерлинг-Оннес, заключалось в следующем. Электрическое сопротивление различных металлов, таких, как ртуть, свинец и олово, полностью резко исчезало при некоторой критической температуре  $T_c$ , своей для каждого металла. Идеальная проводимость считается первым характерным свойством сверхпроводимости.

Другим характерным свойством сверхпроводимости является идеальный диамагнетизм, открытый в 1933 г. Мейсснером и Оксенфельдом. Они обнаружили не только отсутствие проникновения магнитного поля в сверхпроводник, но и «выталкивание» поля из первоначально нормального образца, когда он охлаждается ниже критической температуры. Это явление, конечно, не могло быть объяснено идеальной проводимостью, которая лишь удерживала бы начальный поток внутри образца. Существование обратимого эффекта Мейсснера означает, что сверхпроводимость должна разрушаться критическим магнитным полем  $B_c$ .

В действительности диамагнетизм идеален только для массивных образцов, так как поле всегда проникает на конечную глубину (лондоновскую глубину проникновения)  $\lambda \sim 500 \text{ \AA}$ . [1]

## 1.2 Теория Бардина, Купера, Шриффера

В 1957 году американскими учеными Дж. Бардиным, Л. Купером и Дж. Шриффером была сформулирована теория сверхпроводимости (БКШ). Явление сверхпроводимости оказалось связанным с существованием энергетической щели между основным состоянием и квазичастичным возбуждением системы и возникновением в металлах притяжения между электронами.

Природа этого притяжения носит квантовый характер. Спаривание возникает не между самими электронами, а между низкоэнергетическими возбуждениями в этой системе. Они имеют тот же заряд, что и электрон, и некоторую эффективную массу, однако в металлической фазе их энергии могут быть сколь угодно малыми. Притяжение приводит к перестройке этого спектра и к «открытию»

в нем так необходимой для возникновения энергетической щели Ландау. Часть квазичастиц при достаточно низких температурах объединяются в связанные куперовские пары, которые, пребывая в особом, квантовом состоянии, переносят электрический ток без потерь энергии.

Теория БКШ дает исчерпывающее описание сверхпроводящих свойств материала во всем температурном интервале от 0 до  $T_c$ , но является сложной с математической точки зрения. Поэтому часто физики прибегают к другому, относительно более простому способу анализа сверхпроводящего состояния – теория Гинзбурга–Ландау, которая качественно и количественно описывает поведение сверхпроводника в ограниченном интервале вблизи критической температуры. [1, 2]

### 1.3 Сверхпроводимость 1-го и 2-го рода

Согласно теории Гинзбурга–Ландау, обычно сверхпроводник вблизи  $T_c$  описывается одним комплексным параметром поля. Физика этих систем определяется двумя фундаментальными масштабными длинами: лондоновской глубиной проникновения магнитного поля  $\lambda$  и длиной когерентности  $\xi$ . В целом, сверхпроводник можно описать коэффициентом  $\kappa = \lambda/\xi$ , который определяет реакцию на внешнее магнитное поле, разделяя все сверхпроводники на две категории: сверхпроводники первого рода, где  $\kappa < 1/\sqrt{2}$ , и второго рода, где  $\kappa > 1/\sqrt{2}$ . [3]

ТГЛ основывается на теории фазовых переходов второго рода. В этой теории, наряду с критической температурой, длиной когерентности и глубиной проникновения, вводится еще одна характеристика – параметр порядка. С точностью до коэффициента пропорциональности можно считать, что модуль параметра порядка есть энергетическая щель в теории БКШ. Параметр порядка равен нулю при  $T = T_c$  и принимает максимальное значение, когда температура достигает абсолютного нуля. Параметр порядка играет ключевую роль в теории Гинзбурга–Ландау. Через него выражается свободная энергия сверхпроводника. [4]

Несмотря на то что теория Гинзбурга–Ландау является феноменологической, то есть она не объясняет причины возникновения явления, которое она описывает, с ее помощью был получен ряд важных результатов. Применив эту теорию,

ее авторы вычислили поверхностную энергию, возникающую на границе сверхпроводника и нормального металла в присутствии внешнего магнитного поля. Из расчетов следовало, что для сверхпроводников первого рода поверхностная энергия оказывается положительной. Для сверхпроводника цилиндрической формы, ось которого параллельна силовым линиям магнитного поля, данный результат означал, что переход в нормальное состояние происходит моментально, как только индукция магнитного поля превышает некоторое критическое значение  $B_c$  для данной температуры (рисунок 1.1a), что теоретически подтвердило известный уже на тот момент экспериментальный факт поведения сверхпроводников.

Николай Заварицкий, исследуя тонкие сверхпроводящие пленки, обнаружил, что их поведение в магнитном поле не согласуется с предсказаниями теории Гинзбурга–Ландау. Чтобы понять причину расхождения, Алексей Абрикосов, основываясь на теории Гинзбурга–Ландау, рассмотрел случай, когда поверхностная энергия является отрицательной, то есть рассмотреть поведение сверхпроводника второго рода в магнитном поле.

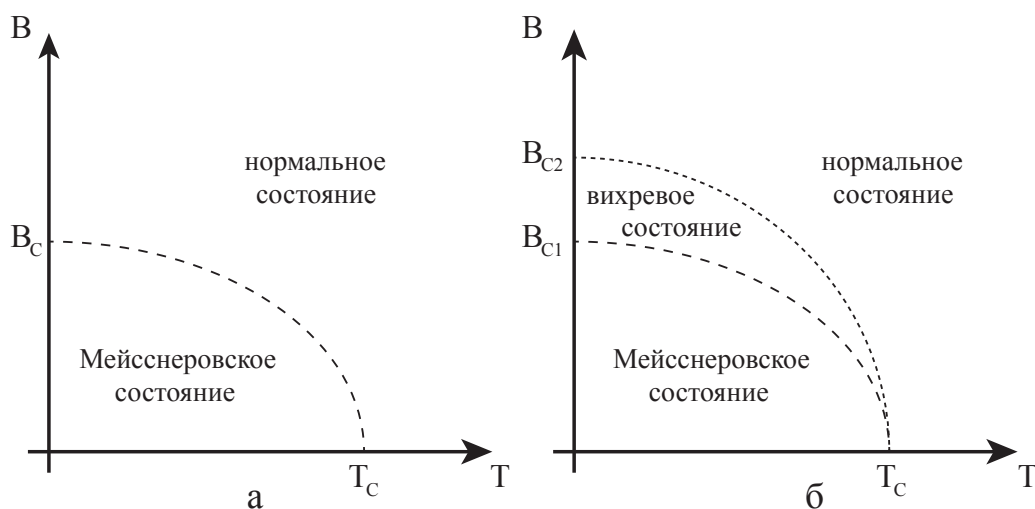


Рисунок 1.1 — Фазовая диаграмма состояния сверхпроводников 1-го (а) и 2-го (б) рода. В мейснеровском состоянии силовые линии магнитного поля не могут проникнуть в вещество. Вихревое состояние означает сосуществование сверхпроводимости и нормальных, несверхпроводящих, тонких нитей, вытянутых вдоль линий магнитного поля

Расчеты показали, что пока индукция магнитного поля не превосходит нижнее критическое значения поля  $B_{c1}$  при фиксированной температуре, сверхпроводник находится в состоянии Мейсснера. После того как индукция магнитного поля стала больше  $B_{c1}$ , сверхпроводник начинают пронизывать «нити» микронных размеров, вытянутые вдоль силовых линий внешнего поля. Чем больше

индукция поля, тем больше ниток будет в сверхпроводнике. Абрикосов установил, что эти образования представляют собой вихри, ядра которых являются не сверхпроводящими, нормальными, с размером порядка длины когерентности  $\xi$ , а вокруг них протекают циркулирующие сверхпроводящие токи, которые экранируют нормальную область вихря, причем ширина области экранировки равна лондоновской глубине проникновения  $\lambda$ ). Кроме того, в ходе вычислений обнаружилось, что вихри несут в себе квант магнитного потока, флюксонид:  $\Phi_0 = hc/2e \simeq 2,07 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2$ . Потенциал взаимодействия вихрей в сверхпроводниках второго рода носит только отталкивающий характер: два вихря будут бесконечно отдаляться друг от друга, минимизируя энергию. Но, поскольку сверхпроводник имеет конечные размеры и вихрей может быть больше двух, то вихри формируют в сверхпроводнике стабильную структуру – треугольную решетку. Такое состояние называют вихревым (рисунок 1.1б).

Впервые смешанное состояние с неполным эффектом Мейсснера–Оксенфельда (фаза Шубникова) в сверхпроводниках, находящихся во внешнем магнитном поле, было обнаружено группой Л. В. Шубникова в 1937 году [5]. В 1957 году А. А. Абрикосов, основываясь на теории Гинзбурга–Ландау [6], показал, что в массивных сверхпроводниках второго рода внешнее магнитное поле проникает в сверхпроводник в виде нитей магнитного потока (вихрей Абрикосова) [3], которые можно рассматривать как структурную единицу смешанного состояния.

Если при постоянной температуре продолжить усиливать магнитное поле, то при верхнем критическом значении  $B_{c2}$  вихрей станет настолько много, что их ядра начнут перекрываться, и они заполнят весь объем сверхпроводника, переводя его в нормальное состояние (рисунок 1.1). [1, 4]

В сверхпроводниках второго рода для того чтобы напряженность внешнего магнитного поля, необходимая для образования вихревых возбуждений, была энергетически выгодной, нужно чтобы  $B_{c1}$  было меньше, чем термодинамическое значение магнитного поля  $B_{ct}$  (поле, энергетическая плотность которого равна энергии конденсации сверхпроводника, т.е. сверхпроводящее состояние становится термодинамически неустойчивым); В сверхпроводниках первого рода напряженность поля требует создание вихревого возбуждения больше, чем критическое термодинамическое значение магнитного поля, т.е. вихри не могут образовываться. Можно выделить также специальный «нульмерный» пограничный случай, когда  $\kappa$  имеет критическое значение точно на границе первого/в-



того рода, что в самой общей модели ГЛ соответствует  $\kappa = 1/\sqrt{2}$ . В этом случае вихри не взаимодействуют в теории Гинзбурга-Ландау.

В двущелевых сверхпроводниках второго рода сверхпроводящие компоненты происходят из электронного куперовского спаривания в различных зонах [7]. Поэтому эти конденсаты не могут быть независимо сохраняющимися.

В случае сверхпроводников первого рода две сверхпроводящие компоненты были предсказаны, происходящие из электронного и протонного куперовского спаривания в атомарном водороде или богатых водородом сплавов. В прогнозируемом жидкометаллическом дейтерии и сплавов богатых дейтерием, было предсказано существование электронной проводимости на сверхвысоких давлениях с дейтронной конденсацией [8–11]. Поскольку электроны не могут быть преобразованы в протон или дейтрон с независимо сохраняющейся конденсацией, и, следовательно, в эффективной модели Джозефсона межкомпонентная связь запрещена на основаниях симметрии. Этот эффект в настоящее время является предметом возобновленных экспериментальных исследований.

Это большое разнообразие систем вызывает необходимость истолковать и классифицировать возможные магнитные отклики многокомпонентных сверхпроводников. В различных источниках обсуждалось, что в многокомпонентных системах, где магнитный отклик гораздо сложнее, чем в обычных системах, разделение на сверхпроводники первого и второго рода не является достаточным для классификации. Скорее всего существует отдельный сверхпроводящий режим, при котором вихри имеют дальнodelствующее притяжение, короткодействующее отталкивание и образование вихревых узлов в области двухкомпонентного эффекта Мейсснера [12, 13]. Последние экспериментальные работы [14, 15] выдвинули предположение, что это состояние реализуется в двущелевом материале  $\text{MgB}_2$ , что вызвало растущий интерес к этой теме. В частности были подняты вопросы по поводу того, что сверхпроводимость типа 1,5 (как это было названо Мошталковым и другими в [14]) возможна даже в случае различных исчезающих связей (например, внутренняя джозефсоновская связь, связь смешанных градиентов и т.д.) сверхпроводящими компонентами в разных диапазонах. [16]

## 1.4 Сверхпроводимость 1,5-го рода и двущелевые сверхпроводники

В 2001 году в дибориде магния  $\text{MgB}_2$  была открыта сверхпроводимость с неожиданно высокой критической температурой 39 К. Применяя различные экспериментальные техники, ученые установили, что большое значение  $T_c$  достигается за счет наличия в  $\text{MgB}_2$  двух энергетических щелей. То есть в сверхпроводящем дибориде магния присутствует два сорта куперовских пар. Их взаимодействие и обеспечивает высокую  $T_c$ . Важно отметить, что у каждого сорта электронных пар есть свой размер, или своя длина когерентности. [2, 4]

Каждой из двух энергетических щелей  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  соответствует своя длина когерентности  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  и лондоновская глубина проникновения  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ . Если применить критерий Абрикосова для  $\text{MgB}_2$ , то получится, что для первой щели  $\kappa = \lambda_1/\xi_1 \approx 0,66 < 1/\sqrt{2}$ , а для второй –  $\kappa = \lambda_2/\xi_2 \approx 3,68 > 1/\sqrt{2}$ . Получается, что в дибориде магния одновременно существуют две сверхпроводимости – первого и второго рода.

В 2003 году в журнале «Physical Review B» появилась статья ученых из России, Швейцарии и США «Vortex structure in  $\text{MgB}_2$  single crystals observed by the Bitter decoration technique», в которой они сообщали о наблюдении абрикосовской решетки в чистом монокристалле  $\text{MgB}_2$  в слабом магнитном поле. Эксперимент показал, что диборид магния, несмотря на наличие в нем двух энергетических щелей, можно отнести к сверхпроводникам второго рода. Результат подтверждался снимком треугольной вихревой решетки. Вихри распределены равномерно – что, по мнению исследователей, доказывает факт наличия в  $\text{MgB}_2$  сверхпроводимости второго рода.

Однако относительно недавно группа исследователей из Бельгии и Швейцарии опубликовала в Архиве препринтов результаты своего эксперимента под говорящим заголовком «Type-1.5 Superconductors». Во внешнем магнитном поле напряженностью 1 эрстед (в 4 раза слабее, чем в эксперименте 2003 года) они получили для сверхпроводящего чистого монокристалла диборида магния необычную картину вихревой решетки – с неравномерным распределением вихрей (рисунок 1.2а). Эта нерегулярность связана с тем, что, как предсказывает теория, взаимодействие магнитных вихрей должно напоминать поведение межмолекулярных сил: на близких расстояниях вихревые структуры отталкиваются, на далеких – начинают притягиваться. Такое поведение вихрей авторы статьи

считают главной особенностью сверхпроводимости полупорного рода. [2]

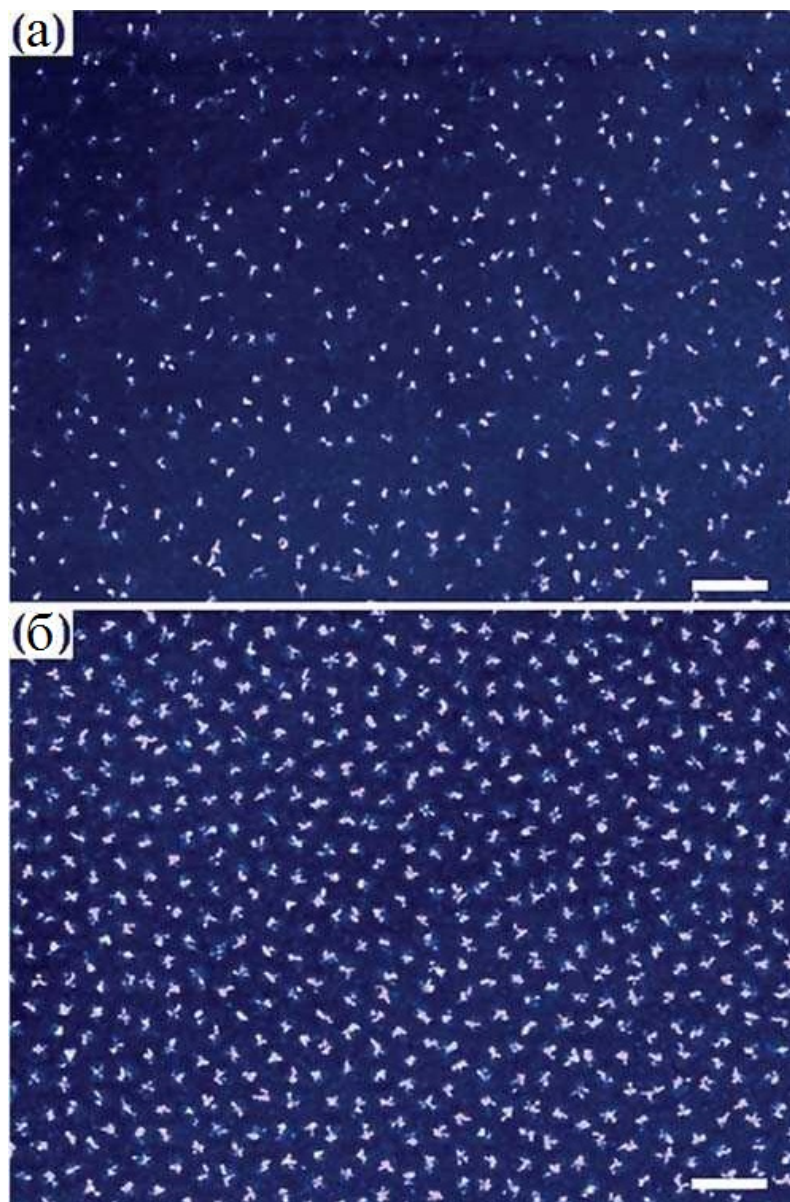


Рисунок 1.2 — Изображения вихревых структур в сверхпроводниках при  $T = 4, 2K$  во внешнем магнитном поле напряженностью  $10^{-4}$  Тл. Вихри в монокристалле  $MgB_2$  (a) распределены неравномерно, тогда как в монокристалле  $NbSe_2$  (b) они образуют треугольную решетку. Длина масштабной линейки 10 мкм

Возможность нового типа сверхпроводимости, отличного от первого и второго рода в многокомпонентных системах [12, 13] основана на следующих соображениях. Краевая задача уравнения Гинзбурга–Ландау в присутствии циркуляции фазы сводится к одномерной задаче в целом. Кроме того, как указано в [12, 13], в общей двухкомпонентной модели есть три фундаментальные масштабные длины, которые указывают на невозможность параметризовать модель с точки зрения одного безразмерного параметра  $\kappa$ . В случае, когда конденсаты не связаны межзонной джозефсоновской связью, при условии, что векторный

потенциал этих масштабных длин представлен двумя независимыми величинами: длиной когерентности и глубиной проникновения магнитного поля. В противоположность этому, в случае, когда конденсаты объединяются межзонными джозефсоновскими условиями, можно не увидеть различий между длинами когерентности и отнести их к различным конденсатам. Тем не менее, в этом случае колебания плотности также могут обладать двумя основными пространственными длинами [13], в отличие от однокомпонентных теорий. В [12, 13] вихревых решениях в двухкомпонентной теории были найдены компоненты, которые имеют немонотонное вихревое взаимодействие, с доминирующими частями отвечающие за дальнедействующее взаимодействие, отталкивающей частью ближкодействия и частью отвечающей за электромагнитное взаимодействие. Важным обстоятельством, которое было продемонстрировано, является то, что эти вихри термодинамически стабильны, несмотря на существование притягивающего хвоста во взаимодействии. [16]

<b>В</b>	<b>1-ый</b>	<b>2-ой</b>	<b>1,5-ый</b>
	нормальное состояние	нормальное состояние	нормальное состояние
		вихревое состояние	вихревое состояние
	состояние Мейсснера	состояние Мейсснера	полумейсснеровское состояние
			состояние Мейсснера

Рисунок 1.3 — Сравнение фазовых диаграмм магнитных фаз чистых сверхпроводников первого, второго и полупервого рода при нулевой температуре

Немонотонный межвихревой потенциал взаимодействия должен привести к образованию вихревых скоплений, кластеров, в слабом магнитном поле, погруженного в безвихревую область, эффект упомянутый в [12] как «полумейсснеровское состояние». На рисунке 1.3 схематически показана фазовая диаграмма сверхпроводника 1,5-го рода. [16]

Формально, в сверхпроводниках 1-го рода тоже есть вихри. Только они там не являются стабильными образованиями. При первом появлении они начинают притягиваться друг другу, причем чем ближе они расположены, тем сильнее притяжение. Зависимость энергии взаимодействия двух вихрей от расстояния между ними представлена на рис. 1.4а. Из графика видно, что энергия взаимодействия вихрей минимальна, когда расстояние между вихрями равно нулю.

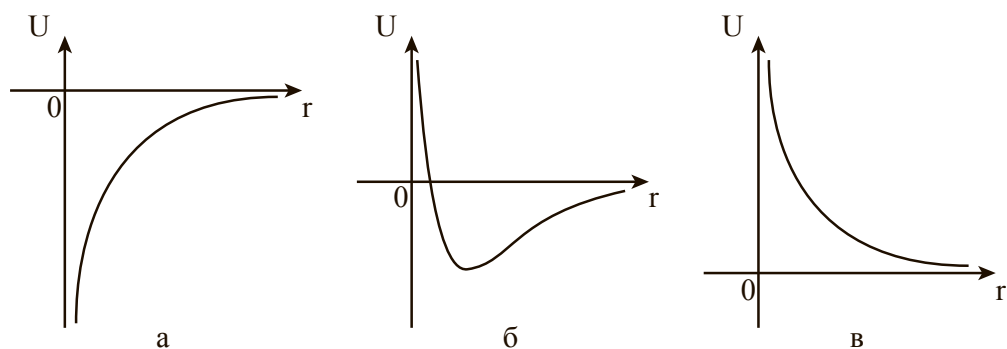


Рисунок 1.4 — Зависимость энергии взаимодействия  $U$  двух вихрей от расстояния  $r$  между ними в сверхпроводнике 1-го рода (а), 1,5-го рода (б) и 2-го рода (в)

Из-за стремления вихрей уменьшить энергию своего взаимодействия они сливаются между собой и образуют нормальные области в сверхпроводнике. Этот процесс возникновения несверхпроводящих участков происходит чрезвычайно быстро, так что можно говорить о моментальном переходе из мейсснеровской фазы в нормальную.

В сверхпроводнике 2-го рода взаимодействие вихрей носит только отталкивающий характер: чем ближе вихри расположены друг к другу, тем сильнее они отталкиваются (рис. 1.4в). Минимум энергии наблюдается, когда вихри удалены друг от друга на бесконечно большое расстояние. Однако, поскольку сверхпроводник имеет конечные размеры, а вихрей может быть больше, чем два, взаимное отталкивание приводит к образованию стабильной структуры – треугольной вихревой решетки.

В сверхпроводниках с двумя щелями, как выяснили Бабаев и Спейт, взаимодействие вихрей качественно совпадает с межмолекулярным взаимодействием: отталкивание на коротких расстояниях сменяется притяжением на далеких расстояниях (рис. 1.4). Существование минимума энергии в отличной от нуля и бесконечности точке на оси  $r$  выражается в стремлении вихрей создавать неоднородные вихревые структуры, группироваться в некие кластеры или вихревые молекулы, когда вокруг определенного вихря на расстоянии, соответствующем этому самому минимуму, энергетически выгодно располагаться остальным вихрям. В итоге реализуется не мейсснеровское состояние (потому что вихри не «слиплись», как в сверхпроводнике 1-го рода), но в то же время и не смешанное (поскольку нет треугольной решетки, как в сверхпроводнике 2-го рода). Поэтому авторы статьи и называли такую фазу сверхпроводника полумейсснеровской [4, 12].

Против введения «нового» типа сверхпроводимости существует множество аргументов от различных ученых и исследователей. В основном, они сходятся на том, что количественный критерий деления сверхпроводников на 1-й и 2-й род проистекает из знака поверхностной энергии границы раздела «сверхпроводник–нормальный металл». Очевидно, что здесь возможны только два случая (вариант с нулем исключается): либо поверхностная энергия положительная, либо отрицательная. Поэтому этот критерий не изменится даже для двухщелевого сверхпроводника. Именно такой довод приводится в статье «Interface energy of two band superconductors», опубликованной в журнале «Physical Review B». Авторы работы, коллектив ученых из США и ЮАР, фактически проделали те же расчеты, что и Абрикосов, но для сверхпроводника с двумя сортами куперовских пар. Они показали, что в случае, когда для первого сорта куперовских пар параметр Гинзбурга–Ландау меньше  $1/\sqrt{2}$ , а для второго он больше  $1/\sqrt{2}$ , поверхностная энергия принимает положительное значение, а потому имеет место сверхпроводимость 1-го рода.

Более того, те же ученые в другой своей статье доказывают, что различие между двумя разновидностями куперовских пар в температурном диапазоне в окрестности  $T_c$ , то есть там, где применяется теория Гинзбурга–Ландау, исчезает, и двухщелевой сверхпроводник превращается в сверхпроводник с одной щелью. [2, 4, 14, 16]

## 2 Молекулярное моделирование

В современном мире методы молекулярной динамики приобретают всё большее и большее значение. Растет производительность вычислительных машин, улучшается качество алгоритмов вычислений; это ведет к росту круга практических и теоретических задач, доступных для исследования и разрешения при помощи вычислительных методов.

### 2.1 Молекулярная динамика

Метод молекулярной динамики (МД) рассматривает поведение вещества на микроуровне – мы наблюдаем за движением отдельных молекул. При этом мы хотим понять поведение сложной многочастичной системы. Ясно, что макроскопические тела содержат слишком много молекул, чтобы их можно было смоделировать. Однако, применение метода МД даже к «небольшим» системам, состоящим из нескольких сотен или тысяч частиц, дает много для понимания наблюдаемых свойств газов, жидкостей и твердых тел. Кроме того, малые системы (наночастицы) имеют свои совершенно новые свойства, изучение которых очень интересно.

#### 2.1.1 Уравнения МД

Несмотря на то, что микрочастицы (атомы и молекулы) – квантовые объекты, в некоторых практически интересных случаях возможно рассматривать их классически. Тогда влияние молекул друг на друга описывается потенциалом взаимодействия  $U$ . Простейший случай – парное взаимодействие, когда  $U_{ij} = U(r_{ij})$ , где  $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ . Суммарная потенциальная энергия равна  $E_p = \sum_{i < j} U_{ij}$ . Сила,

действующая на данную молекулу,  $\mathbf{F}_i = -\frac{\partial E_p}{\partial \mathbf{r}_i}$ . Движение частиц описывается вторым законом Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i.$$

Получаем систему  $N$  обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка ( $N$  – число частиц). Как известно, такую систему можно переписать в

виде  $2N$  уравнений первого порядка:

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{a}_i,$$

где  $\mathbf{v}_i$  – скорости частиц,  $\mathbf{a}_i = \mathbf{F}_i/m_i$  – их ускорения.

### 2.1.2 Алгоритм Верле

Полученную систему уравнений необходимо дополнить начальными условиями  $\mathbf{r}_i(t = 0) = \mathbf{r}_{i0}$ ,  $\mathbf{v}_i(t = 0) = \mathbf{v}_{i0}$  и решить каким-нибудь методом. При решении наибольшее время занимает расчет сил взаимодействия (число операций пропорционально  $N^2$ ), поэтому хорошо бы выполнять его пореже. В то же время, порядок точности метода хотелось бы иметь побольше (говорят, что порядок точности метода равен  $k$ , если при уменьшении шага по времени  $\Delta t$  ошибка уменьшается как  $(\Delta t)^k$ ). Подходящим методом оказывается алгоритм Верле в скоростной форме. Он записывается следующим образом:

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^n + \mathbf{v}_i^n \cdot \Delta t + \mathbf{a}_i^n \cdot \frac{\Delta t^2}{2}, \quad \mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^n + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_i^n + \mathbf{a}_i^{n+1})\Delta t.$$

Здесь верхние индексы обозначают номер шага по времени. Этот алгоритм имеет третий порядок точности, если шаг по времени постоянный.

Критерием для выбора шага по времени может служить условие сохранения полной энергии системы

$$E = \sum_i \frac{m_i v_i^2}{2} + \sum_{i < j} U_{ij},$$

Приемлемым можно считать сохранение  $E$  с точностью 0,5 %.

### 2.1.3 Потенциалы взаимодействия

На базе МД-моделирования исследование физической или биологической системы достигается прежде всего путем введения адекватных потенциалов, описывающих взаимодействия связей и всевозможных степеней свободы. Потенциальная энергия, включающая соответствующие вклады, выглядит при этом



следующим образом:

$$U = U_{\text{ВМС}} + U_{\text{угл}} + U_{\text{торс}} + U_{\text{электростат}} + U_{\text{эксп}},$$

где  $U_{\text{ВМС}}$  – потенциал внутримолекулярной связи,  $U_{\text{угл}}$  – потенциал угловой связи,  $U_{\text{торс}}$  – торсионный потенциал,  $U_{\text{электростат}}$  – электростатический потенциал,  $U_{\text{эксп}}$  – эмпирическая часть полного потенциала.

Наиболее употребительные потенциальные функции, широко применяющиеся в МД-расчетах при изучении конденсированных фаз и динамики биомолекул:

- 1) энергия невалентных короткодействующих атом-атомных взаимодействий представляется в виде парных потенциалов:

— потенциал Леннард–Джонса

$$U_{\text{ВМС}}(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

где  $\sigma$  – эффективный диаметр атома,  $\varepsilon$  – глубина потенциальной ямы.

— Потенциал Букингема

$$U_{\text{ВМС}}(r_{ij}) = A \exp \left( -\frac{r_{ij}}{\rho} \right) - \frac{C}{r_{ij}^6},$$

где  $A$  – амплитуда,  $\rho$  – эффективный радиус взаимодействия.

— Потенциал Борна–Хаггинса–Мейера

$$U_{\text{ВМС}}(r_{ij}) = A \exp[B(\sigma - r_{ij})] - \frac{C}{r_{ij}^6} - \frac{D}{r_{ij}^8},$$

где  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $\sigma$  – постоянные параметры, определяемые эмпирически или на основе модельных вычислений.

- 2) Энергия внутримолекулярных связей, торсионная энергия вращения вокруг одинарных связей представляются в виде следующих потенциалов:

— потенциал гармонической связи

$$U_{\text{ВМС}}(r_{ij}) = \frac{1}{2}k(r_{ij} - r_0)^2,$$

где  $k$  – жесткость связи.

— потенциал Морса

$$U_{\text{ВМС}}(r_{ij}) = E_0 \left[ \left( 1 - e^{-k(r_{ij}-r_0)} \right)^2 - 1 \right],$$

где  $E_0$  – амплитуда потенциала,  $k$  – постоянный параметр.

— потенциал валентной угловой связи

$$U_{\text{угл}}(\vartheta_{jik}) = \frac{k}{2}(\vartheta_{jik} - \vartheta_0)^2,$$

где  $\vartheta_0$  – равновесное значение валентного угла.

— потенциал гармонической косинусоидальной связи

$$U_{\text{угл}}(\vartheta_{jik}) = \frac{k}{2} [\cos(\vartheta_{jik}) - \cos(\vartheta_0)]^2.$$

— потенциал торсионной угловой связи

$$U_{\text{торс}}(\psi_{ijkn}) = \frac{1}{2}k(\psi_{ijkn} - \psi_0)^2,$$

где  $\psi_0$  – равновесное значение равновесного угла.

— потенциал косинусоидальной связи

$$U_{\text{торс}}(\psi_{ijkn}) = A[1 + \cos(m\psi_{ijkn} - \delta)].$$

## 2.2 Пакеты для расчета молекулярной динамики

Для расчетов молекулярной динамики применяются различные программные пакеты, например: GROMACS, CharMM, Amber, LAMMPS, NAMD и т. д.

Отдельный пакет представляет собой набор программ, предназначенных для расчета траекторий движения отдельных частей молекулы (отдельных атомов), аппроксимированной механической системой физических материальных точек, связанных набором сил.

Алгоритм вычислений сводится к итерационному процессу, на каждом шаге которого:

- 1) по имеющемуся набору координат материальных точек (ядер атомов) вычисляются значения сил, например, кулоновские, валентные и прочие;
- 2) далее вычисляются значения ускорений для каждого центра, в соответствии со значением действующей результирующей силы и массы этого центра;
- 3) затем решаются уравнения движения в предположении, что силы и ускорения не изменяются во времени. Координаты центров системы для некоего времени  $\tau$  записываются в память. Время  $\tau$  называют шагом интегрирования. Вычисленные координаты и скорости передаются на следующий шаг.

Такая модель достаточно адекватно описывает движения молекулярных структур, если достаточно точно вычислены силовые константы и шаг интегрирования не слишком велик.

Молекулярно-динамические расчеты являются весьма ресурсоемкими, в связи с чем размер исследуемых систем обычно невелик. Поэтому важной проблемой является постановка таких граничных условий, которые бы не вносили в поведение системы заметных искажений. На настоящий момент наиболее адекватной представляются так называемые периодические граничные условия. Исследуемая система окружается виртуальным параллелепипедом («ящика»), границы которого любая частица может свободно пересекать; но при пересечении границы частица переносится на другую сторону системы, то есть из ее координаты вычитается поперечный размер ящика. Таким образом, с одной стороны, система является ограниченной, но, с другой стороны, граница представлена копией самой системы.

Для ускорения расчетов пренебрегают электростатическими и Ван-дер-Ваальсовыми взаимодействиями атомов, находящихся на большом расстоянии друг от друга. Расстояние, начиная с которого взаимодействия считаются малыми и не учитываются называют «радиусом обрезания» (англ. *cutoff*). Его конкретная величина не зависит от программного пакета и задается пользователем.

Макроскопические характеристики такой небольшой молекулярной системы сильно флуктуируют. Для поддержания среднего давления и температуры разработаны специальные алгоритмы, называемые соответственно баростатом и термостатом. Термостат вводит в систему тепловой шум, приближая распределение скоростей к нормальному Максвелловскому распределению для заданной

температуры. Баростат изменяет объем ящика для создания давления, равного заданному. [18, 19]

Траектории атомов должны генерироваться в заданном ансамбле, в соответствии с теми термодинамическими условиями, в которых изучается система. Разработаны эффективные алгоритмы интегрирования, позволяющие моделировать эволюцию и динамику системы (от простой атомарной до сложной молекулярной) в самых разнообразных ансамблях (при постоянном числе частиц, температуре, давлении, энтропии: NVE, NVT, NPT, NST и др.)

Система может быть соединена с термостатом для поддержания ее температуры вблизи требуемого значения  $T_f$ . Для этой цели удобно использовать, например, термостат Нозэ–Хувера

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = \mathbf{v}(t), \quad \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = \frac{\mathbf{F}(t)}{m} - \kappa(t)\mathbf{v}(t).$$

Если потребуется изменять динамическим образом размер и форму ячейки для того, чтобы сохранить среднее давление внутри нее на уровне значения  $P_f$ , то один из способов – использовать баростат Берендсена

$$\frac{dP(t)}{dt} = \frac{P_f - P}{\tau_P}.$$

Однако, температуру и давление необходимо вычислять.

Температура пропорциональна средней кинетической энергии, приходящейся на одну внутреннюю степень свободы. При этом необходимо исключить движение центра масс –  $d$  степеней свободы ( $d$  – размерность пространства) и вращение системы как целого – для изолированных кластеров – 1 степень свободы в плоском случае, 3 в трехмерном.

Например, для плоского кластера получаем:

$$T = \frac{2}{(2N - 3)k} \sum \frac{m_i(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{cm})^2}{2},$$

где  $\mathbf{v}_{cm}$  – скорость центра масс кластера.

Давление можно вычислять различными способами. Один из них следует из теоремы вириала:

$$PV = NkT + \frac{1}{d} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i \right\rangle,$$

где  $\mathbf{r}_i$  и  $\mathbf{F}_i$  – координата и полная сила, действующая на частицу с номером  $i$ , угловые скобки означают усреднение по времени. В случае парных взаимодействий можно также воспользоваться равенством

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i = \sum_{i < j} \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij}$$

и вычислять вириал одновременно с расчетом ускорений.

## 2.3 LAMMPS

Молекулярное моделирование в данной работе было выполнено с использованием программного пакета LAMMPS (англ. *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* – параллельный симулятор крупномасштабных атомов и молекул). Пакет специально разработан для параллельных вычислений на кластерах, так же существуют версии и для однопроцессорных вычислительных машин. Разработчиками пакета являются Сандийские национальные лаборатории (англ. *Sandia National Laboratories*). Пакет написан на языке C++, имеет открытый исходный код и является некоммерческим, распространяемым по лицензии GPL. [17]

Для сообщения между процессорами в многопроцессорной версии используется стандарт MPI (англ. *Message Passing Interface* – интерфейс передачи сообщений). При расчетах на многопроцессорных системах используется метод пространственной декомпозиции.

Пакет может применяться для моделирования крупных систем (до десятков миллионов атомов). [17, 19]

В LAMMPS реализована поддержка большинства двухчастичных и многочастичных короткодействующих потенциалов, например, потенциалы Леннарда-Джонса, Морзе, Юкавы, EAM, AI-REBO; при расчетах короткодействующих сил используются так называемые списки соседей. Пакет имеет встроенные термостаты, баростаты, методы добавления внешних сил и потенциальных стенок.

Сам по себе пакет LAMMPS не выполняет какую-либо пост-обработку данных или же их визуализацию. Существует возможность записи атомных конфигураций в текстовый или бинарный файл, который, в дальнейшем, можно

использовать для обработки полученных данных и построения графиков. Начальная конфигурация атомов для расчета может быть как сгенерирована в программе, так и прочитана из бинарного или текстового файла.

Для расчета систем с потенциалами Леннард–Джонса и Кулона пакет позволяет использовать графические процессоры по технологии CUDA (англ. *Compute Unified Device Architecture* – архитектура устройств с поддержкой универсальных вычислений). [17]

## 2.4 Модельный эксперимент

В данной работе потенциал взаимодействия вихрей аппроксимируется потенциалом Морзе. Он представляется формулой [20]

$$U(r) = D_0 \cdot \left( e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right), \quad (2.1)$$

где  $D_0$  – глубина потенциальной ямы,  $r_0$  – равновесное расстояние,  $\alpha$  – параметр, характеризующий ширину потенциальной ямы.

Значения параметров были получены для достижения наилучшего приближения численно рассчитанного потенциала взаимодействия вихрей потенциалом Морзе:

$$D_0 = 1,45828 \text{ эВ}, \quad r_0 = 307,95 \text{ нм}, \quad \alpha = 0,00468302 \text{ нм}^{-1}. \quad (2.2)$$

Рассчитанный с такими коэффициентами потенциал имеет вид, представленный на рисунке 2.1.

Моделируемая система представляет собой двумерный ящик размерами  $1,6 \times 1,6$  нм, в котором находилось 1024 частицы, расположенных в узлах квадратной решетки шагом  $50 \text{ \AA}$ . Моделирование проводилось с использованием термостата (использовался ансамбль NVT: постоянное число частиц, постоянный объем ящика, постоянная температура системы), на ящик накладывались периодические граничные условия.

Код входного скрипта приведен в приложении А. Для визуализации полученных данных был написан скрипт на языке Python. Его код приведен в приложении Б.

При моделировании была получена неупорядоченная система частиц, прихо-

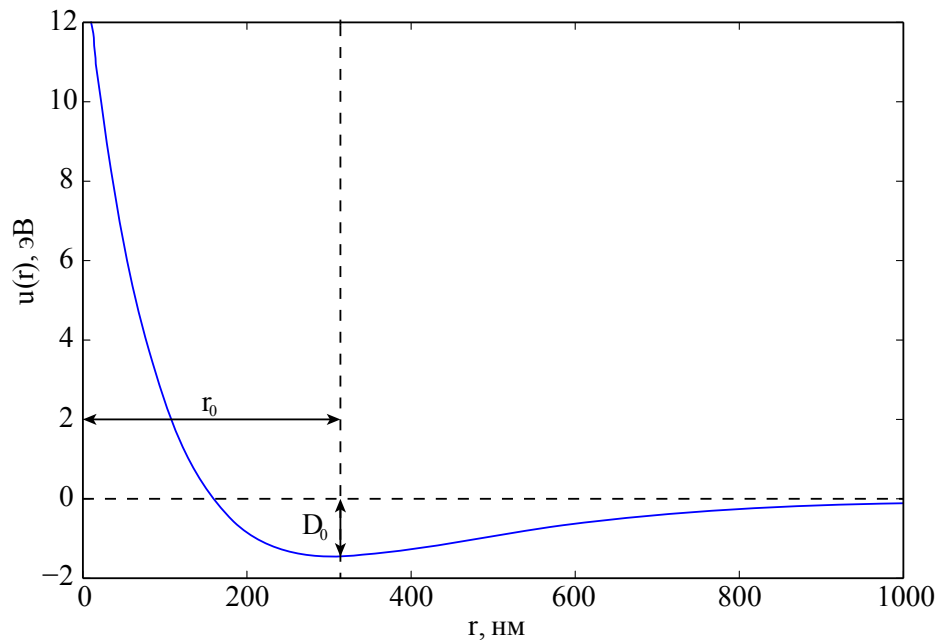


Рисунок 2.1 — Вид потенциала Морзе (2.1) с параметрами, обозначенными в формуле (2.2)

дующая за время около 15–20 нс в состояние «равновесия», в котором частицы отдельных кластеров при сильном приближении к другим частицам набирают скорость в сторону покидания кластера, однако при отдалении начинают притягиваться обратно, что соответствует поведению вихрей в сверхпроводниках: при сильном сближении токи сверхпроводимости и создаваемые ими магнитные поля различных вихрей начинают накладываться друг на друга, что приводит к их отталкиванию, при отдалении на большие же расстояния вихри начинают притягиваться.

На рисунках 2.2–2.7 представлены срезы системы в моменты времени 10 и 15 нс для температур 20, 10 и 4 К.

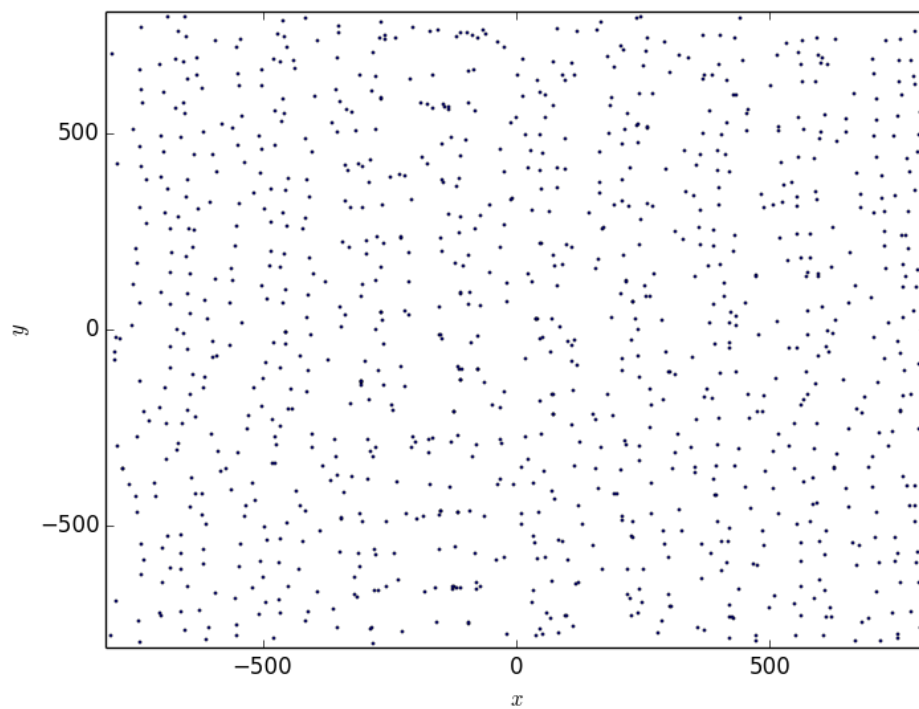


Рисунок 2.2 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 20 К. Момент времени 10 нс

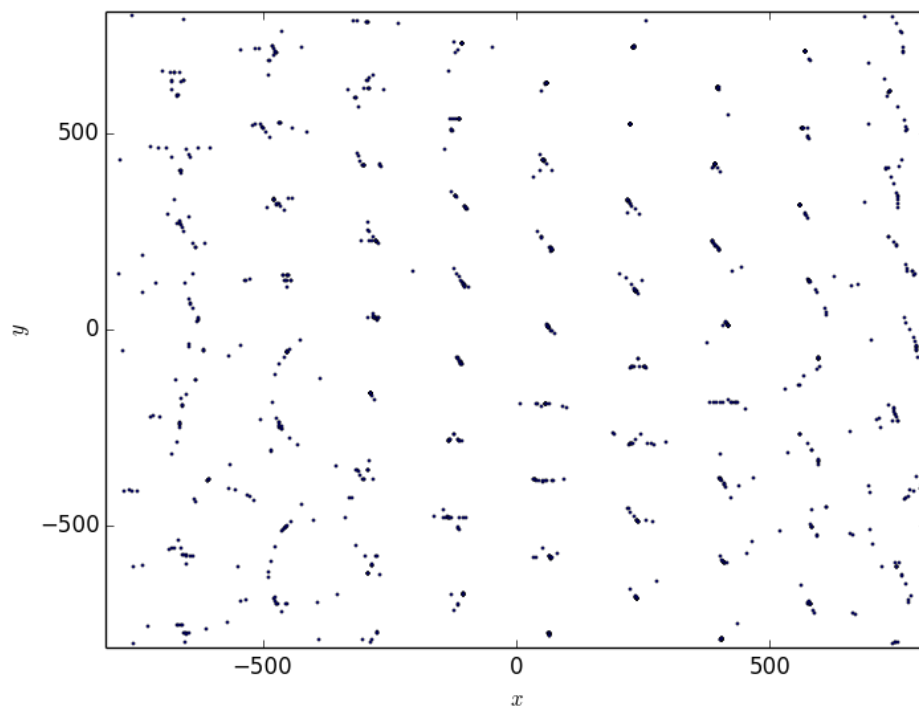


Рисунок 2.3 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 20 К. Момент времени 15 нс



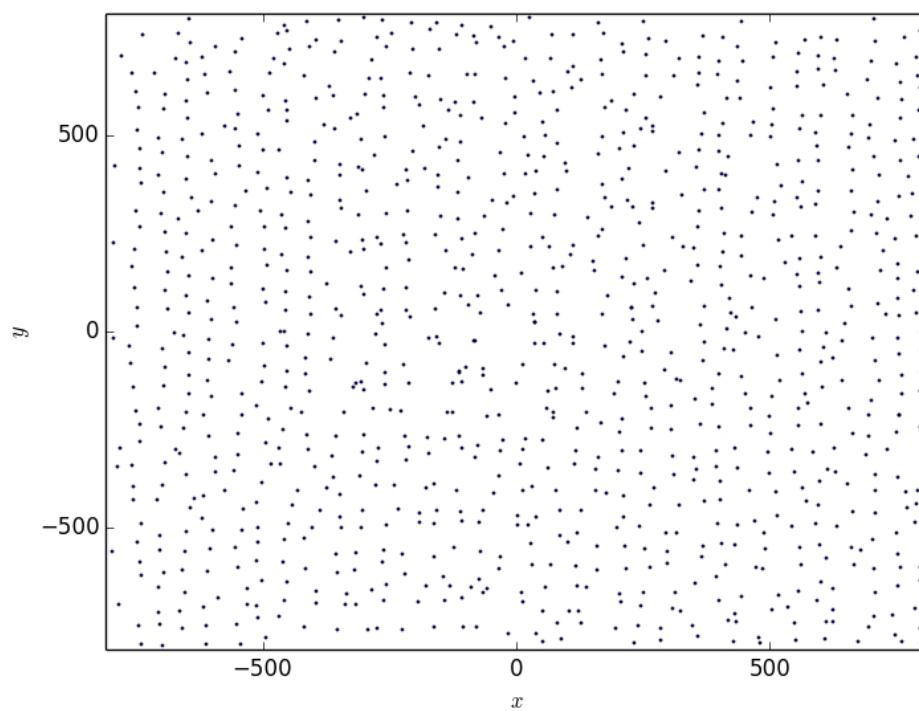


Рисунок 2.4 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 10 К. Момент времени 10 нс

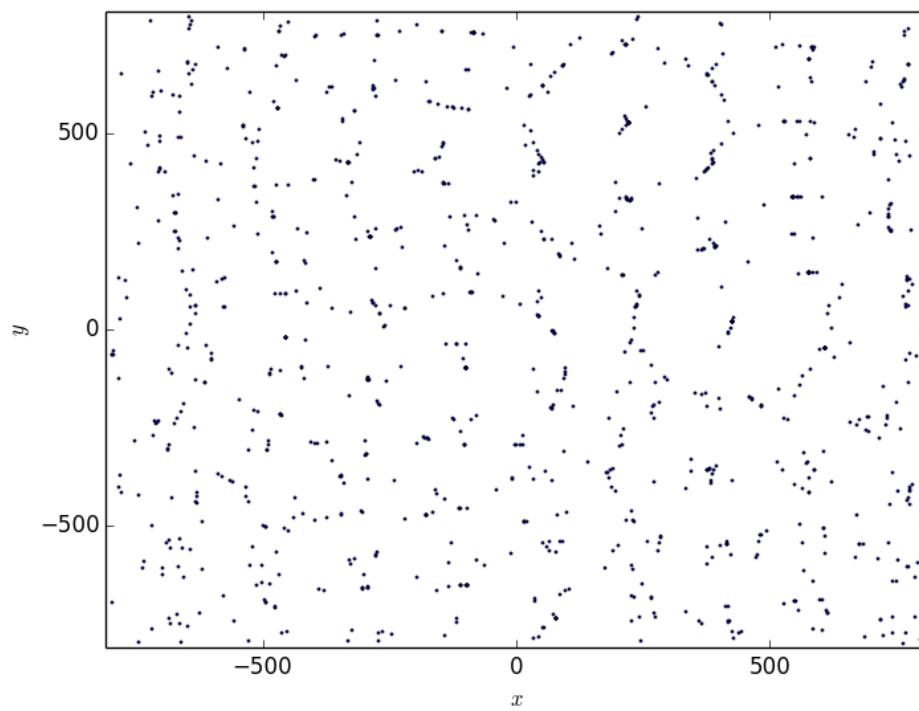


Рисунок 2.5 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 10 К. Момент времени 15 нс

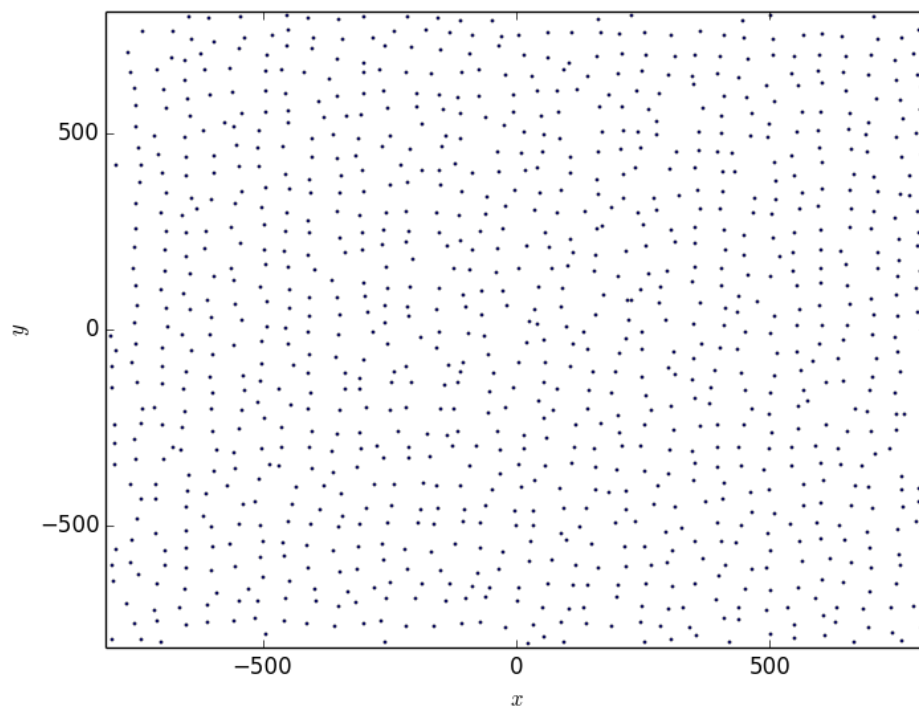


Рисунок 2.6 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 4 К. Момент времени 10 нс

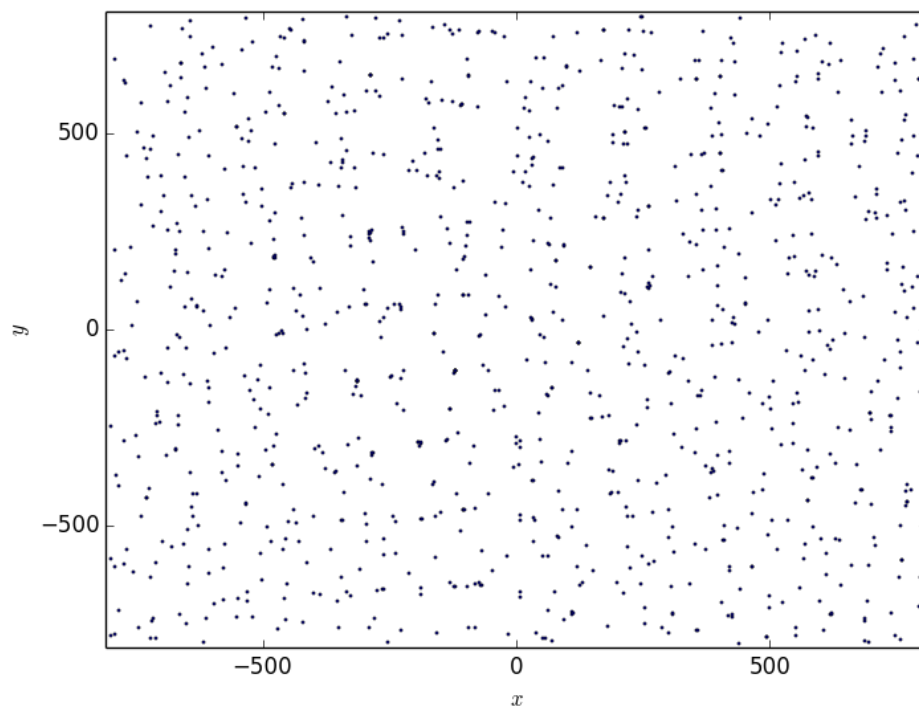


Рисунок 2.7 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 4 К. Момент времени 15 нс

На рисунках 2.8 и 2.9 для сравнения приведена структура сверхпроводников 1,5 рода при температурах 4 и 20 К.

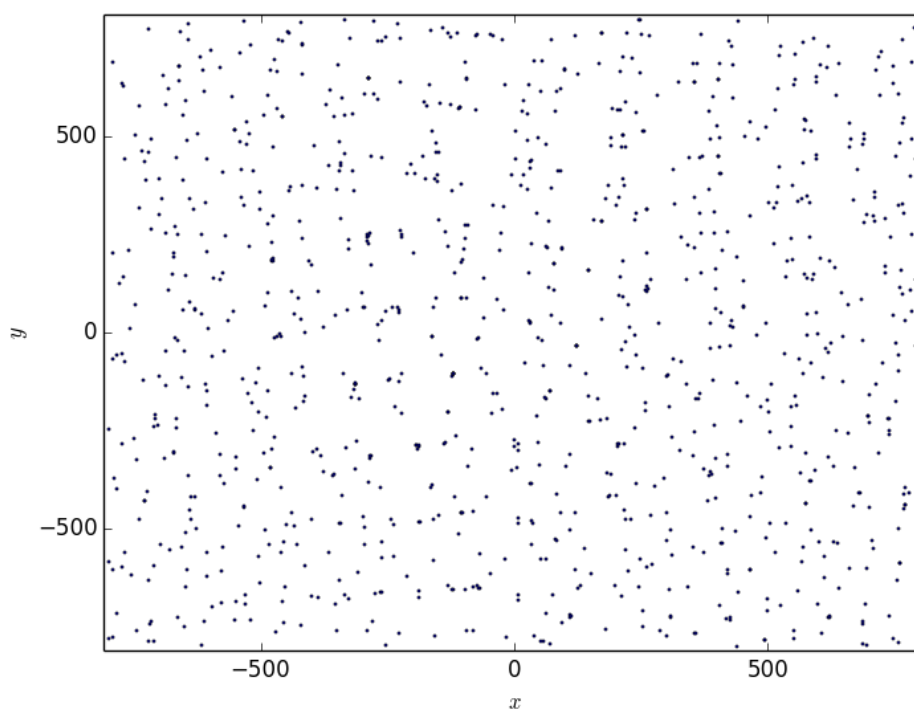


Рисунок 2.8 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 4 К. Момент времени 15 нс

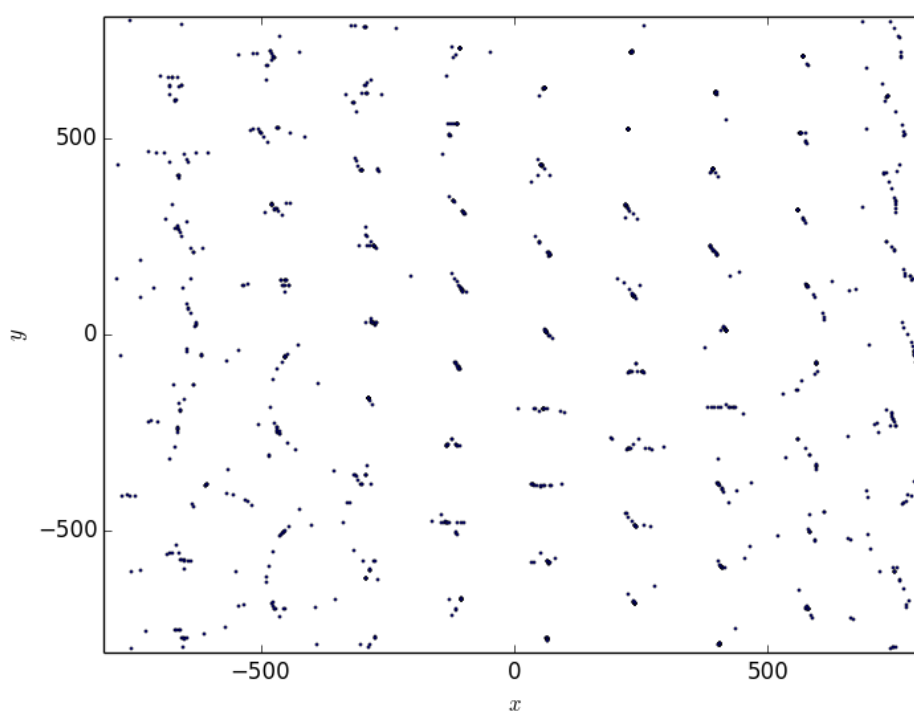


Рисунок 2.9 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 20 К. Момент времени 15 нс

На рисунках 2.10–2.15 представлены срезы систем, моделирующих сверхпроводники полупроводного и второго рода, для момента времени 15 нс для температур 20, 10 и 4 К.

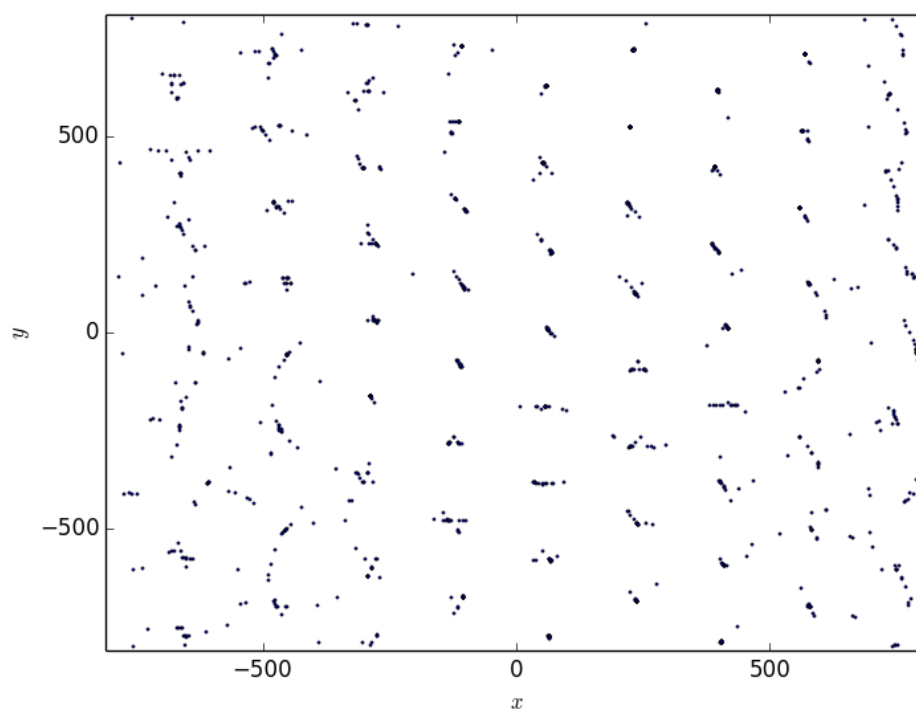


Рисунок 2.10 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 20 К. Момент времени 15 нс

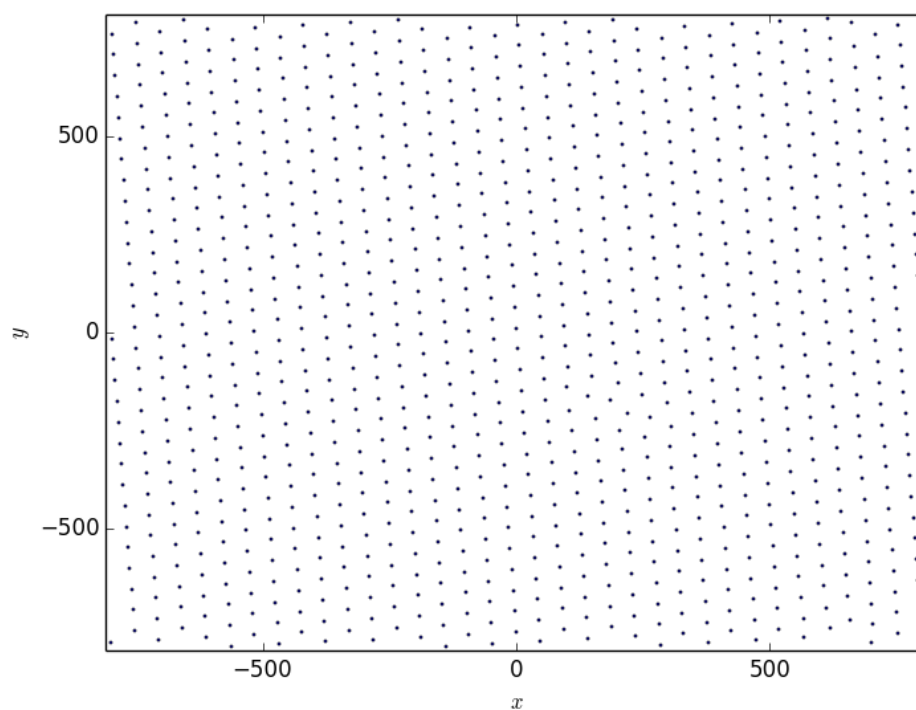


Рисунок 2.11 — Сверхпроводник 2 рода. Температура 20 К. Момент времени 15 нс

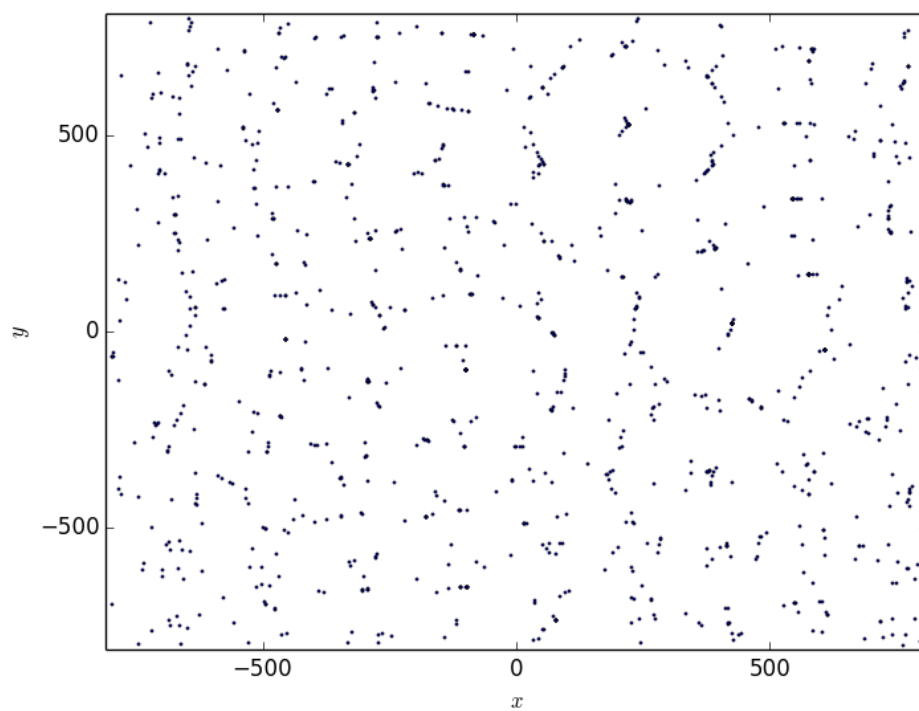


Рисунок 2.12 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 10 К. Момент времени 15 нс

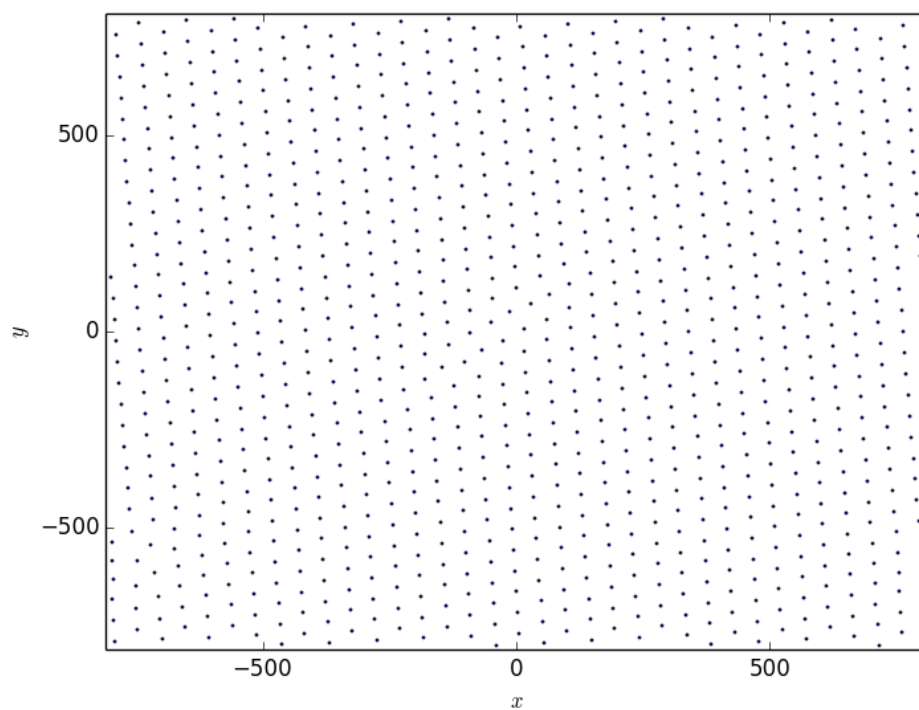


Рисунок 2.13 — Сверхпроводник 2 рода. Температура 10 К. Момент времени 15 нс

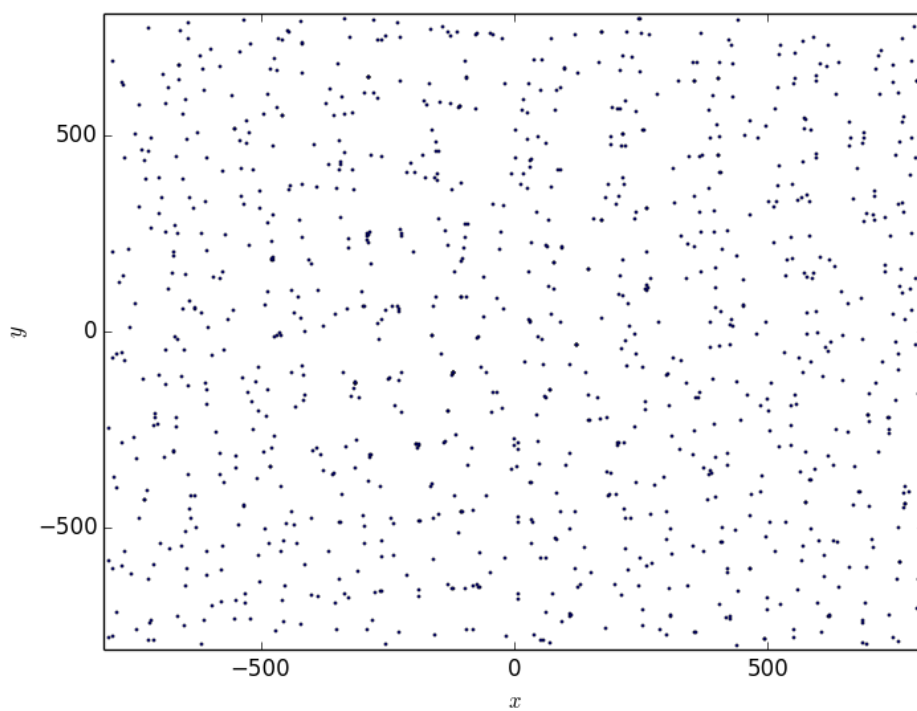


Рисунок 2.14 — Сверхпроводник 1,5 рода. Температура 4 К. Момент времени 15 нс

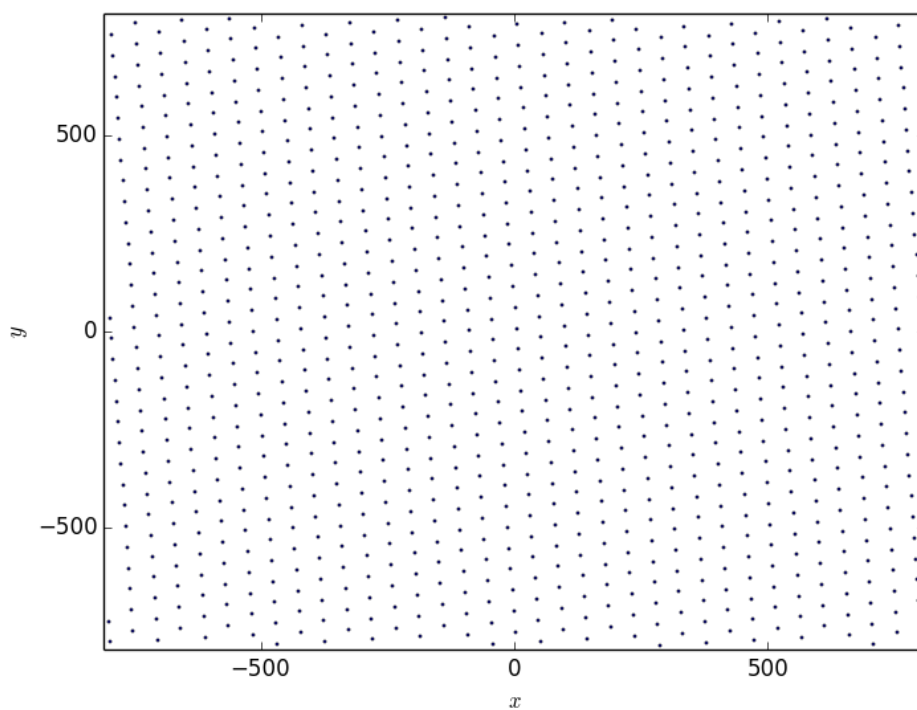


Рисунок 2.15 — Сверхпроводник 2 рода. Температура 4 К. Момент времени 15 нс

На рисунках 2.10–2.15 явно видны отличия структуры вихревого состояния сверхпроводника: структура смешанного состояния сверхпроводника второго рода имеет треугольную решетку абрикосова, полупроводного рода – неупорядоченные скопления вихрей. В этом есть главное отличие сверхпроводимости полупроводного рода от других родов.

По рисункам 2.8 и 2.9 видно, каким образом температура влияет на скорость кластеризации: при повышении температуры кластеризация идет гораздо быстрее. Однако, при повышении температуры сверхпроводник может перейти в обычное состояние, в случае сильного сближения, слияния вихрей. Именно так сверхпроводники первого рода переходят из сверхпроводящего в нормальное состояние. Но принято считать [4], что сверхпроводники первого рода переходят в нормальное состояние практически мгновенно; здесь же если это и будет происходить, то это займет большее, чем в случае сверхпроводимости первого рода, время. На рисунке 2.9 заметно, что вихри начали скапливаться возле «кластерных центров», так что система в состоянии, изображенном на рисунке 2.9, ближе остальных изображенных систем находится на пути перехода в непроводящее состояние. Система, изображенная на рисунке 2.8, наоборот, является отличным образцом отсутствия какой-либо упорядоченности частиц.

Таким образом, можно сказать, что при низких температурах и малых значениях магнитных полей [2, 4, 14, 16] существует состояние сверхпроводника, которое не подходит ни сверхпроводнику первого рода, ни сверхпроводнику второго рода. В отличие от первого рода здесь не наблюдается состояния Мейсснера, а в отличие от второго – смешанного состояния. Данное состояние названо полумейсснеровским. [12, 14, 16]

## Заключение

В данной работе была представлена попытка смоделировать динамику вихрей абрикосова в сверхпроводниках полуторного типа. Для этого использовался некоммерческий пакет молекулярного моделирования LAMMPS. Потенциал, благодаря которому частицы при моделировании вели себя подобно абрикосовским вихрям задавался формулой (2.1) с коэффициентами из (2.2). Было продемонстрировано, что структура системы таких частиц отличается от структуры смешанного состояния сверхпроводников первого и второго родов. Так же было показано, что температура влияет на скорость кластеризации и на переход в обычное, непроводящее состояние в случае сильного сближения вихрей.

Таким образом, моделируемая система имела свойства как сверхпроводников первого (переход в нормальное состояние слиянием вихрей), так и второго рода (собственно, существование вихревого состояния).

Так же моделируемое полумейснеровское состояние системы имело отличия от состояний сверхпроводников обоих родов: неупорядоченная структура вихрей в отличие от треугольной структуры смешанного состояния сверхпроводников второго рода, существование вихревого состояния и продолжительный во времени переход в несверхпроводящее состояние в отличие от сверхпроводников первого рода.



## СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Тинкхам, М. Введение в сверхпроводимость / М. Тинкхам ; под ред. К. К. Лихарева ; пер. с англ. В. К. Корнева [и др.]. — Москва : Атомиздат, 1980. — 312 с. : ил.
- 2 Коган, Н. Н. Сверхпроводимость [Электронный ресурс] // Электронный каталог Science & Technology. — Режим доступа: <http://www.science-techno.ru/nt/article/sverkhprovodimost> (дата обращ. 18.04.2014).
- 3 Абрикосов, А. А. О магнитных свойствах сверхпроводников второй группы / А. А. Абрикосов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1957. — Т. 32, № 6. — С. 1442–1452.
- 4 Ерин, Ю. Сверхпроводимость 1,5-го рода: ни два, ни полтора [Электронный ресурс] // Научно-популярный проект «Элементы». — Режим доступа: <http://elementy.ru/news/431450> (дата обращ. 18.04.2014).
- 5 Магнитные свойства сверхпроводящих металлов и сплавов / Л. В. Шубников, В. И. Хоткевич, Ю. Д. Шепелев, Ю. Н. Рябин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1937. — Т. 7, № 2. — С. 221–237.
- 6 Гинзбург, В. Л. К теории сверхпроводимости / В. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1950. — Т. 20. — С. 1064.
- 7 Suhl, H. Bardeen-cooper-schrieffer theory of superconductivity in the case of overlapping bands / H. Suhl, B. T. Matthias, L. R. Walker // Physical Review Letters. — 1959. — V. 3. — P. 552–554.
- 8 Ashcroft, N. W. Hydrogen dominant metallic alloys: High Temperature Superconductors? / N. W. Ashcroft // Physical Review Letters. — 2004. — V. 92. — P. 187002.
- 9 Mouloupoulos, K. Generalized coulomb pairing in the condensed state / K. Mouloupoulos, N. W. Ashcroft // Physical Review Letters. — 1991. — V. 66. — P. 2915–2918.

10 Vortex sublattice melting in a two-component superconductor / E. Smørgrav, J. Smiseth, E. Babaev, A. Sudbø // Physical Review Letters. — 2005. — V. 94. — P. 096401.

11 Herland, E. V. Phase transitions in a three dimensional  $U(1) \times U(1)$  lattice london superconductor: Metallic superfluid and charge-4e superconducting states / E. V. Herland, E. Babaev, A. Sudbø // Physical Review B. — 2010. — V. 82. — P. 134511.

12 Babaev, E. Semi-meissner state and neither type-i nor type-ii superconductivity in multicomponent superconductors / E. Babaev, M. Speight // Physical Review B. — 2005. — V. 72. — P. 180502.

13 Babaev, E. Type-1.5 superconducting state from an intrinsic proximity effect in two-band superconductors / E. Babaev, J. Carlström, M. Speight // Physical Review Letters. — 2010. — V. 105. — P. 067003.

14 Type-1.5 superconductivity / V. Moshchalkov [et al] // Physical Review Letters. — 2009. — V. 102. — P. 117001.

15 Scanning squid microscopy of vortex clusters in multiband superconductors / T. Nishio [et al] // Physical Review B. — 2010. — V. 81. — P. 020506.

16 Carlström, J. Type-1.5 superconductivity in multiband systems: Effects of interband couplings / J. Carlström, E. Babaev, M. Speight // Physical Review B. — 2011. — V. 83. — P. 174509.

17 LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Electronic resource] // Sandia National Laboratories — Mode of access: <http://lammps.sandia.gov/index.html> (date of access 10.02.2014).

18 Зленко, Д. В. Современные методы молекулярного моделирования [Электронный ресурс] / Д. В. Зленко, П. А. Мамонтов, А. М. Нестеренко // ERG Research Group: Лаборатория теоретической биофизики — Режим доступа: <http://erg.biophys.msu.ru/erg/wordpress/wp-content/uploads/2009/03/bpmanual.pdf> (дата общ. 03.05.2014).

19 Применение суперкомпьютеров для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных средах [Электронный ресурс] / А. В. Янилкин [и др.] // Вычислительные методы и программирование. — Режим доступа: [http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom\\_2010/pdf/v11r113.pdf](http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom_2010/pdf/v11r113.pdf) (дата обращения: 03.05.2014).

20 Потенциал Морзе — Department of Theoretical Mechanics [Электронный ресурс] // Кафедра «Теоретическая механика» СПбГУ — Режим доступа: [http://tm.spbstu.ru/Потенциал\\_Морзе](http://tm.spbstu.ru/Потенциал_Морзе) (дата обращения: 10.05.2014).

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

### Код входного файла для LAMMPS для моделирования сверхпроводника 1,5 рода при температуре 20K

```
1 # u(r) = D0 (e^(-2a (-r0 + r)) - 2e^(-a (-r0 + r)))
2 # u(r) = 1.45828 (e^(-0.00936604 (-307.95 + r)) - 2e^(-0.00468302 (-307.95 + r)))
3 # эВ, нм
4
5 units metal # система единиц: эВ, 0.1 нм
6 atom_style atomic
7 dimension 2 # двумерная модель
8 boundary p p p # периодические ГУ
9
10 lattice sq 50.0 # квадратная сетка, масштаб x50
11 region box block -16 16 -16 16 -0.01 0.01 # размер коробки 32x32 (количество атомов = 1024)
12 create_box 1 box
13 create_atoms 1 box
14 mass 1 1.0
15
16 pair_style morse 195.0 # потенциал Морзе, радиус обрезания = 19.5 нм
17 # D0 [ev] a [1 / A] r0 [A]
18 pair_coeff 1 1 1.45828 0.000468302 3079.5 # коэффициенты для потенциала
19
20 neighbor 5.0 bin # списки соседей
21 neigh_modify delay 0 every 20 check no
22
23 fix 1 all enforce2d # фикс: модель двумерная, а не трехмерная
24 fix 2 all nvt temp 20.0 20.0 0.1 # фикс: постоянные объем и температура (20K)
25
26 dump myDump all custom 5000 data\morse_20K.dump x y vx vy # вывод координат и скоростей в файл
27
28 #compute myRDF all rdf 1024 1 1
29 #fix 3 all ave/time 100 1 100 c_myRDF file data\morse_20K.rdf mode vector
30 run 30000
```

## ПРИЛОЖЕНИЕ Б

### Код скрипта для визуализации данных, записанных LAMMPS в dump-файл

```
1 # -----
2 #
3 # принимаемые параметры: [имя_файла] скорость временные интервалы [-step:шаг -num -quiet -notitle]
4 # имя_файла — название файла с dump-ом, стандартно = 'data/morse.dump'. Не может принимать
5 # значения из списка: ['True', 'False', '0', '1']
6 # скорость — логический параметр, отвечающий за отрисовку скоростей на графике.
7 # Принимает значения из списка ['True', 'False', '0', '1'],
8 # при значениях True и 1 — скорости рисуются, иначе — нет
9 # временные интервалы — значения timestep из файла, для которых нужно построить графики.
10 # Возможны перечисления: 0 1 2 3 — построит графики в моменты времени 0, 1, 2, 3;
11 # интервалы: 0-10 — 0, 1, ..., 10;
12 # интервалы с шагом: 0-10,2 — 0, 2, 4, ..., 10;
13 # и их различные комбинации: 0 1 10-20,2 25-1000,25
14 # ключ -step:шаг задает стандартный шаг для интервалов временных значений, например,
15 # 0-10 -step:2 построит графики в моменты времени 0, 2, 4, ..., 10
16 # ключ -num отвечает за простановку номеров атомов (номер берется по порядку появления в файле dump)
17 # ключ -quiet отвечает за отключение вывода в консоль
18 # ключ -notitle отвечает за показ подписи (шапки: времени и количества атомов) к рисунку
19 #
20 # с именем файла будет связана папка сохранения графиков: 'plots/' + измененное_имя_файла
21 #
22 # примеры использования:
23 # python plot_dump.py False 50 100-250,25 350 400 500-510 -quiet
24 # построит графики по данным из файла data/morse.dump в моменты времени
25 # 50, 100, 125, 150, 175, 200, 225, 250, 350, 400, 500, 501, 502, ..., 509, 510
26 # без отрисовки скоростей и вывода текстовой информации в консоль.
27 # Графики будут сохранены в папку 'plots/morse'
28 #
29 # python plot_dump.py data/sec.dump True 0-2000,500 2250-10000 12000-20000 11000 -defstep:250
30 # построит графики по данным из файла data/sec_10K.dump в моменты времени
31 # 0, 500, 1000, 2000, 2250, ..., 9750, 10000, 11000, 12000, 12250, ..., 19750, 20000
32 # с отрисовкой скоростей атомов.
33 # Графики будут сохранены в папку 'plots/sec_10K'
34 #
35 # -----
36
37 from sys import argv
38 from re import sub, match
39 from matplotlib import pyplot as plt
40 import os
41
42 defstep = 1 # интервал между двумя последующими временными срезами
43 defchanged = False
44 number = False
45 out = True
46 title = True
47 file = ['data/morse.dump'] * 2
48
49 if not (argv[1] in ['True', 'False', '0', '1']):
50     file = [argv[1]] * 2
51     del argv[1]
52
53 while '/' in file[1]:
54     file[1] = file[1].split('/')[-1]
55 while '\\' in file[1]:
56     file[1] = file[1].split('\\')[-1]
57 if '.' in file[1]:
```

```

58     file[1] = file[1].split('.')[0]
59
60     for each in argv[:]:
61         if match(r'-step:[0-9]+', each):
62             defstep = int(each.split(':')[1])
63             defchanged = True
64             argv.remove(each)
65         if match(r'-num', each):
66             number = True
67             argv.remove(each)
68         if match(r'-notitle', each):
69             title = False
70             argv.remove(each)
71         if match(r'-quiet', each):
72             print 'INFO: output disabled'
73             out = False
74             argv.remove(each)
75
76     if out & defchanged: print 'INFO: default step changed to %d' % defstep
77     if out & number: print 'INFO: enabled printing numbers'
78     if out & (not title): print 'INFO: disabled printing title'
79
80     velocity = {'True': True, 'False': False, '1': True, '0': False}.get(argv[1], False)
81     # определяем количество аргументов
82     if len(argv) < 3:
83         # должно быть не меньше 2-х
84         print 'ERR: not enough arguments'
85         exit()
86     elif len(argv) > 3:
87         # если больше или равно 2-м, то собираем из них список
88         times = argv[2:]
89     else:
90         times = [argv[2]]
91     if out: print 'determining the time moments...'
92     timestep = []
93     for each in times:
94         if match(r'[0-9]+-[0-9]+-[0-9]+', each):
95             # если задан интервал значений, добавляем к списку timestep этот интервал
96             # если задан шаг, то изменяем его
97             begin = int(each.split('-')[0])
98             end, step = map(int, each.split('-')[1].split(','))
99             if (end < begin) & out:
100                 print 'WARN: an interval %d-%d will be ignored cause of %d < %d' % (begin, end, end, begin)
101                 end += step
102                 timestep += map(str, range(begin, end, step))
103         elif match(r'[0-9]+-[0-9]+', each):
104             begin, end = map(int, each.split('-'))
105             if (end < begin) & out:
106                 print 'WARN: an interval %d-%d will be ignored cause of %d < %d' % (begin, end, end, begin)
107                 end += defstep
108                 timestep += map(str, range(begin, end, defstep))
109         else:
110             # иначе — добавляем одно значение
111             timestep.append(each)
112
113     if timestep == []:
114         print 'ERR: nothing to plot'
115         exit()
116
117     if out: print 'reading "%s" file...' % file[0]
118     f = open(file[0]).read()

```

```

119 for i in range(10):
120     f = sub(' %d ' % i, ' %d.0 ' % i, sub(' %d ' % i, ' %d.0 ' % i, f))
121     f = sub(' -%d ' % i, ' -%d.0 ' % i, sub(' -%d ' % i, ' -%d.0 ' % i, f))
122 f = sub(' \n', '\n', f)
123 lines = [line.rstrip() for line in f.split('\n')]
124
125 if out: print 'determining region...'
126 # определяем границы графика
127 region = map(lambda(x): float(x) + float(x) / abs(float(x)) * 10,
128 lines[next(i for i in range(len(lines))
129 if lines[i-1] == 'ITEM: BOX BOUNDS pp pp pp')].split(' '))
130
131 if out: print 'searching for time moments in file...'
132 # определяем строку, открывающую часть о данном моменте времени
133 timeline = []
134 for each in timestep:
135     timeline.append(next(i for i in range(len(lines))
136 if (lines[i-1] == 'ITEM: TIMESTEP') & (lines[i] == each)))
137
138 if out: print 'plotting...'
139 # оставляем строки с информацией о вихрях в момент времени timestep
140 dir = 'plots/%s' % file[1]
141 if not os.path.exists(dir):
142     os.makedirs(dir)
143     if out: print 'INFO: created directory %s' % dir
144 for k in range(len(timeline)):
145     if out: print ' started: %s, %s' % (timestep[k], velocity)
146     name = '%s/%s_%s.png' % (dir, timestep[k], velocity)
147
148     if out: print ' getting data...'
149     curr = lines[timeline[k]:] # curr начинается со строки = timestep
150     begin = curr.index('ITEM: ATOMS x y vx vy') + 1 # нужные строки начнутся после шапки
151     end = curr.index('ITEM: TIMESTEP') if 'ITEM: TIMESTEP' in curr else -1
152     # и закончатся появлением следующего timestep либо концом файла
153     curr = curr[begin:end]
154     if title: atom_num = lines[timeline[k] + 2] # количество атомов в данный момент
155
156     # разбиваем строки на 4 списка чисел
157     for i in range(len(curr)):
158         curr[i] = map(float, curr[i][: -1].split(' '))
159
160     x, y, vx, vy = map(list, zip(*curr))
161     if velocity:
162         # переносим начало вектора скорости в центр соответствующего атома
163         for i in range(len(vx)):
164             vx[i] += x[i]
165             vy[i] += y[i]
166             vx, vy = zip(x, vx), zip(y, vy)
167
168     if out: print ' plotting...'
169     plt.xlabel(r'$x$')
170     plt.ylabel(r'$y$')
171     if title: plt.title(r'Timestep: %s; num of atoms: %s' % (timestep[k], atom_num))
172     plt.axis(region * 2)
173     plt.plot(x, y, 'bo', linewidth=2, markersize=1.5)
174     if number:
175         if out: print ' printing numbers...'
176         for i in range(len(x)):
177             plt.text(x[i], y[i], str(i), fontsize=6)
178     if velocity:
179         if out: print ' drawing velocity vectors...'

```

```
180         for i in range(len(vx)):
181             plt.plot(vx[i], vy[i], 'g')
182         if out: print '    saving...'
183         plt.savefig(name)
184         if out: print '    saved: %s\n' % name
185         plt.clf()
```