

Молекулярная динамика

Этап №1

Гафиров Абдималик НФИбд-01-18; Логинов Сергей НФИбд-01-18;
Мулихин Павел НФИбд-01-18; Наливайко Сергей НФИбд-01-18;
Смирнова Мария НФИбд-01-18; Сорокин Андрей НФИбд-03-18

Метод молекулярной динамики рассматривает поведение вещества на микроуровне - мы наблюдаем за движением отдельных молекул. При этом мы хотим понять поведение сложной многочастичной системы. 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.

Влияние молекул друг на друга

Влияние молекул друг на друга мы будем описывать потенциалом взаимодействия в его простейшем случае - парном взаимодействии:

$$U_{ij} = U(r_{ij}), \text{ где } r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|.$$

Движение частиц мы будем описывать вторым законом

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

Ньютона:

Перепишем полученную систему N уравнений второго порядка в виде системы $2N$ уравнений первого порядка. Здесь мы введем скорости и ускорения частиц:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i, \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \mathbf{a}_i.\end{aligned}$$

Алгоритм Верле в скоростной форме выглядит следующим образом:

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

В таком случае нам придется использовать два массива для хранения ускорений, но мы можем переписать схему, чтобы этого избежать:

$$\mathbf{v}_i^{n+1/2} = \mathbf{v}_i^n + \mathbf{a}_i^n \cdot \frac{\Delta t}{2},$$

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^n + \mathbf{v}_i^{n+1/2} \cdot \Delta t,$$

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^{n+1/2} + \mathbf{a}_i^{n+1} \cdot \frac{\Delta t}{2}.$$

Выбор шага по времени

Критерием для выбора шага по времени будет 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%

Потенциал Леннард-Джонса

Потенциал – описывает парное взаимодействие молекул.
Мы будем использовать Потенциал Леннард-Джонса,
который выглядит следующим образом:

$$U_{LJ}(r) = \varepsilon \left(\left(\frac{b}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{b}{r} \right)^6 \right) .$$

Чтобы соотносить результаты нашей модели и гораздо большей системы нам необходимо будет задать периодические граничные условия.

Обобщим нашу задачу. Мы хотим написать программу двумерной молекулярной динамики. Для этого нам необходимо:

1. Задать начальные условия с нулевым суммарным импульсом частиц.
2. Граничные условия задать периодическими.
3. Подобрать подходящий шаг по времени.
4. Проверить сохранение полной энергии и импульса