

Молекулярная динамика

Этап №4

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

На четвертом этапе мы бы хотели подвести итоги нашего проекта.

На первом этапе мы узнали, что такое Молекулярная динамика (МД) и как молекулы влияют друг на друга. Их мы описали потенциалом взаимодействия в его простейшем случае - парном взаимодействии:

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

Так же мы ввели алгоритм Верле в скоростной форме, но мы переписали схему, чтобы избежать использование двух массивов для хранения ускорений:

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

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

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

Мы использовали Потенциал Леннард-Джонса, который выглядит следующим образом:

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

На втором этапе мы узнали, что метод молекулярной динамики рассматривает поведение вещества на микроуровне. 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.

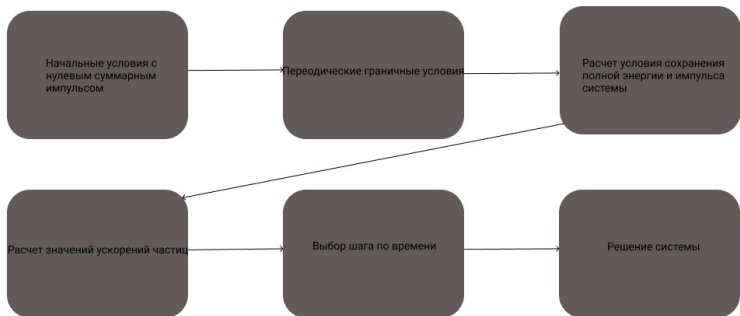
Используя алгоритм Верле, представленный выше, мы так же вычислили значения ускорений перед началом цикла по

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

времени:

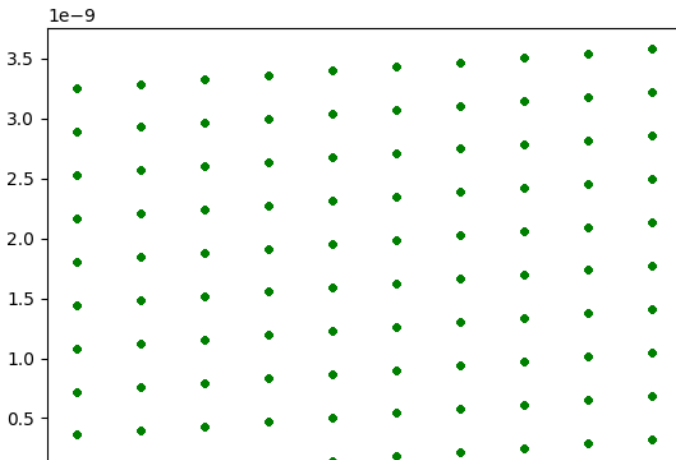
В конечном итоге второго этапа мы построили алгоритм для программы двумерной молекулярной динамики:

Алгоритм решения



Третий этап. Кристаллическая решетка меди

В ходе третьего этапа проекта мы смоделировали процесс двумерной молекулярной динамики и получили кристаллическую решетку меди:



В нашем проекте мы познакомились и изучили
Молекулярную динамику, построили алгоритм решения
проблемы и смоделировали процесс двумерной молекулярной
динамики