

Молекулярная динамика

Этап №3

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

Ход работы

Для примера возьмем атом меди со следующими начальными условиями

$$N = 100$$

$$a = 2.5974 * 10^{-10}$$

$$b = 1.1956 * 10^{-20}$$

$$m = 1.07 * 10^{-27}$$

Составим программный код, который будет моделировать поведение атомов меди.

Программный код

```
47 if __name__ == "__main__":
48     '''Начальные условия'''
49     N = 100
50     a = 2.5974 * pow(10, -10)
51     b = 1.1956 * pow(10, -20)
52     m = 1.07 * pow(10, -27)
53     dt = 0.00000001
54
55     atoms = generate_data(N, a)
56
57     save_plot(atoms, 0)
58
59     for k in range(1, 10):
60         for i in range(N):
61             F_sum = 0
62             for j in range(N):
63                 if i == j:
64                     break
65                 F_sum += u_LD(atoms[i], atoms[j], a, b)
66             w = F_sum / m
67             if k == 1:
68                 atoms[i].v1x = atoms[i].v0x + w * dt
69                 atoms[i].v1y = atoms[i].v0y + w * dt
70                 atoms[i].x1 = atoms[i].x0 + atoms[i].v1x * dt
71                 atoms[i].y1 = atoms[i].y0 + atoms[i].v1y * dt
72                 atoms[i].v0x = atoms[i].v1x
73                 atoms[i].v0y = atoms[i].v1y
74             else:
75                 atoms[i].xt = 2 * atoms[i].x1 - atoms[i].x0 + w * pow(atoms[i].x1, 2)
76                 atoms[i].yt = 2 * atoms[i].y1 - atoms[i].y0 + w * pow(atoms[i].y1, 2)
77                 atoms[i].x0 = atoms[i].x1
78                 atoms[i].x1 = atoms[i].xt
79                 atoms[i].y0 = atoms[i].y1
80                 atoms[i].y1 = atoms[i].yt
81     save_plot(atoms, k)
```

Рис. 1: Отрывок кода на Python

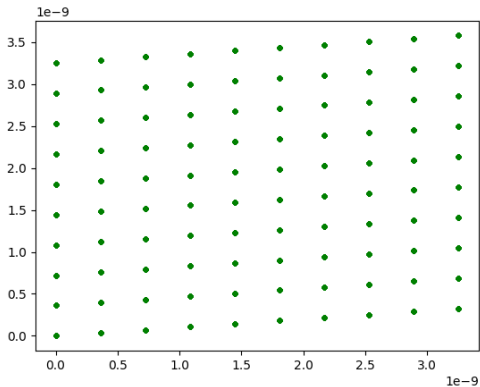


Рис. 2: Кристаллическая решетка меди

Вывод

В ходе третьего этапа проекта мы смоделировали процесс двумерной молекулярной динамики