

1. Celem laboratorium było wykonanie symulacji struktury fulerenów metodą symulowanego wyżarzania z potencjałem Brennera.
2. Potencjał Brennera opisuje oddziaływanie pomiędzy dwoma ciałami, ale zawiera także informację o liczbie aktualnie utworzonych wiązań. Ponieważ modelowaną strukturą jest fuleren C60, liczba wiązań na atom jest ograniczona do 4.

Całkowitą energię potencjalną układu opisuje wyrażenie:

$$V_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n V_i \quad (1)$$

gdzie V_i to energia oddziaływania i -tego atomu z najbliższymi sąsiadami:

$$V_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n f_{\text{cut}}(r_{ij}) [V_R(r_{ij}) - B_{ij} V_A(r_{ij})] \quad (2)$$

Funkcja ograniczająca zasięg przestrzenny $f_{\text{cut}}(r)$ jest zdefiniowana jako:

$$f_{\text{cut}}(r) = \begin{cases} 1, & r \leq R_1 \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{r-R_1}{R_2-R_1} \pi \right) \right], & R_1 < r \leq R_2 \\ 0, & r > R_2 \end{cases} \quad (3)$$

Potencjał odpychania $V_R(r)$ i potencjał przyciągania $V_A(r)$ wyrażone są wzorami:

$$V_R(r) = \frac{D_e}{S-1} \exp \left[-\sqrt{2S\lambda} (r - R_0) \right] \quad (4)$$

$$V_A(r) = \frac{D_e S}{S-1} \exp \left[-\sqrt{\frac{2}{S}} \lambda (r - R_0) \right] \quad (5)$$

Czynnik skalujący potencjał przyciągania B_{ij} definiujemy jako średnią:

$$B_{ij} = \frac{B_{ij} + B_{ji}}{2} \quad (6)$$

Wyraz macierzy B_{ij} :

$$B_{ij} = (1 + \zeta_{ij})^{-\delta} \quad (7)$$

gdzie

$$\zeta_{ij} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^n f_{\text{cut}}(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \quad (8)$$

oraz:

$$g(\theta_{ijk}) = a_0 \left[1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + (1 + \cos \theta_{ijk})^2} \right] \quad (9)$$

Kąt θ_{ijk} to kąt pomiędzy wektorami $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ oraz $\vec{r}_{ik} = \vec{r}_k - \vec{r}_i$, którego cosinus wyliczamy jako:

$$\cos \theta_{ijk} = \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{r}_{ik}}{r_{ij} r_{ik}} \quad (10)$$

2.1. Funkcja korelacji par

Funkcja korelacji par definiowana jest jako:

$$PCF(r) = \frac{2\Omega}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j>i} \delta(r - r_{ij}) d\Omega \quad (11)$$

gdzie $\delta(r)$ to delta Diraca, w symulacji zastąpiona delta Kroneckera ze względu na abstrakcyjny charakter tej pierwszej. Ω to objętość obszaru symulacji, w tym przypadku prawie redukowalny do sfery fulereny:

$$\Omega = 4\pi r_{sr}^2 \quad (12)$$

gdzie r_{sr} to średnia odległość atomów od środka układu:

$$r_{sr} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i \quad (13)$$

natomiast element w symulacji $d\Omega$ wyraża pole powierzchni w pierścieniu o promieniu r i szerokości dr :

$$d\Omega = 2\pi r dr \quad (14)$$

W celu zasymulowania przyjęto pewne uproszczenia:

$$r_{\max} = 2.5 \cdot r_{sr} \quad (15)$$

$$\Delta r = \frac{r_{\max}}{M} \quad (16)$$

$$m = \left\lfloor \frac{r}{\Delta r} \right\rfloor \quad (17)$$

Algorytm polega na iteracji po wszystkich możliwych parach oraz dodaniu nowej wartości do funkcji PCF o ile policzony element mieści się w zakresie symulacji (tj. $m < M$)

$$pcf[m] = pcf[m] + \frac{2 \cdot 4\pi r_{sr}^2}{n^2 \cdot 2\pi r \cdot \Delta r} = \frac{2 \cdot \Omega}{n^2 \cdot \Delta \Omega r} \quad (18)$$

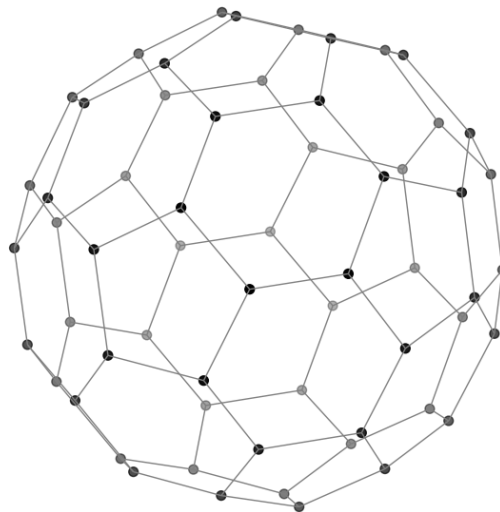
3. Wyniki

W celu zasymulowania zmian wprowadzono pętlę, w której w każdym ze 100 kroków przemieszczano atomy o niewielkie wartości. Symulacja odbyła się poprzez dodanie wartości do promienia oraz obrót, a następnie transformację na układ kartezjański; niezależnie w każdym kroku zwiększano całkowity promień sfery po której oryginalnie były rozłożone atomy. Otrzymane dane początkowe zostały przedstawione na 1, wiązania zostały zdefiniowane pomiędzy atomami bliższymi niż 2.2Å - wartość ta została wyznaczona empirycznie tak, żeby zachować jak najwięcej

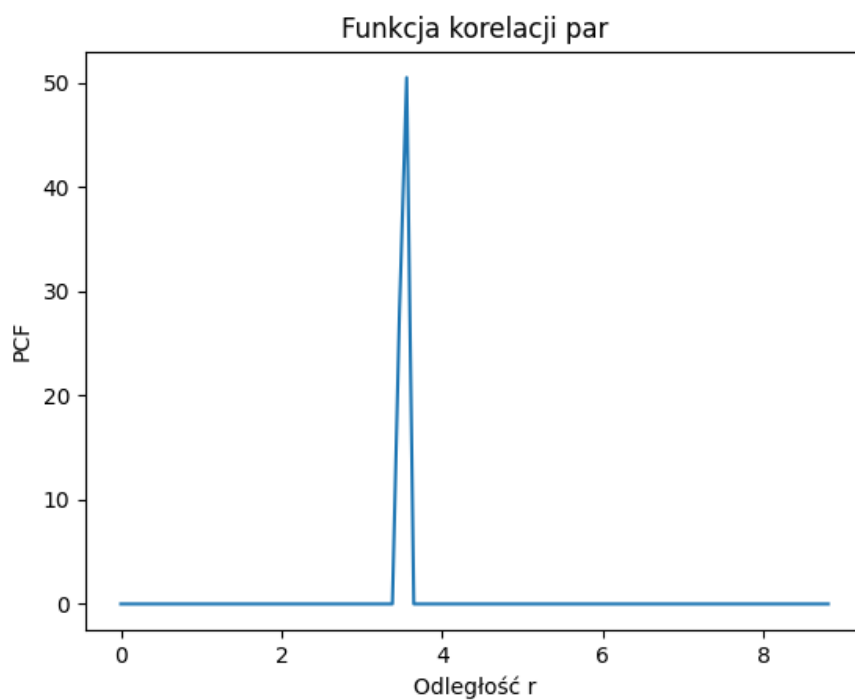
wiązań podczas ruchu atomów, ale również ograniczyć się do tylko najbliższych sąsiadów. W wyniku ćwiczenia skupiono się również na badaniu parametru w_r oraz W_{all} - przede wszystkim zwiększano ich wartości 10, 100 oraz 1000-krotnie. Przyczyną był brak

zauważalnych zmian w układzie. Zmiany były możliwe do zaobserwowania jako pojedyncze przesunięcia atomów (szczególnie na animacji - przedostatnia klatka na 4). Funkcje energii przedstawiono na (3) - stała wartość świadczy o braku zmian.

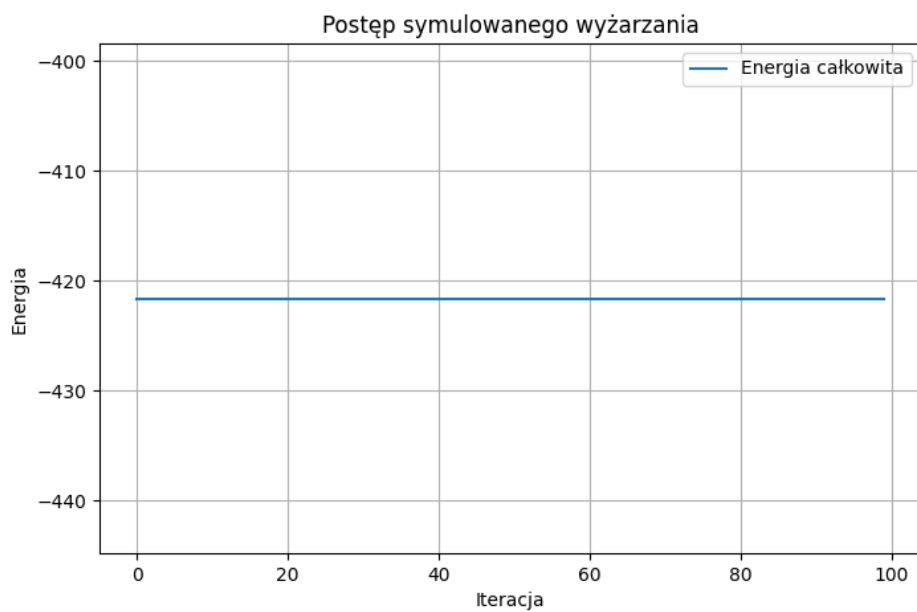
Obliczona funkcja korelacji par względem teoretycznego atomu w środku sfery dała oczekiwany wynik - ponieważ sfera jest okrągła, więc atomy fulerenu są praktycznie w tej samej odległości od środka - widoczny jest mocny pik równy średniej odległości na 2. Na 5 przedstawiono również wykres pomiędzy parami atomów.



Rys 1. Początkowy wykres fulerenu C60.



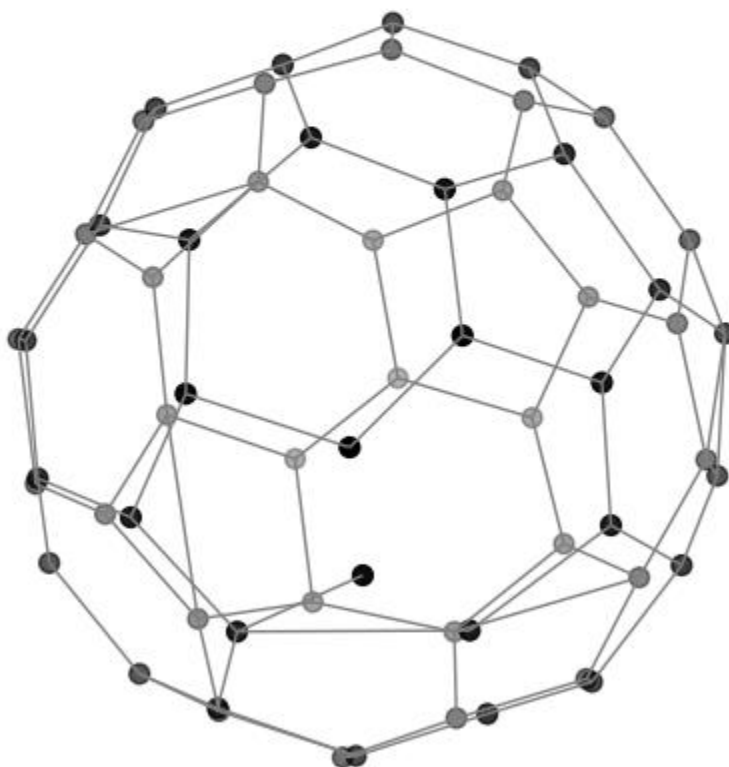
Rys 2. Wykres korelacji par względem 0.



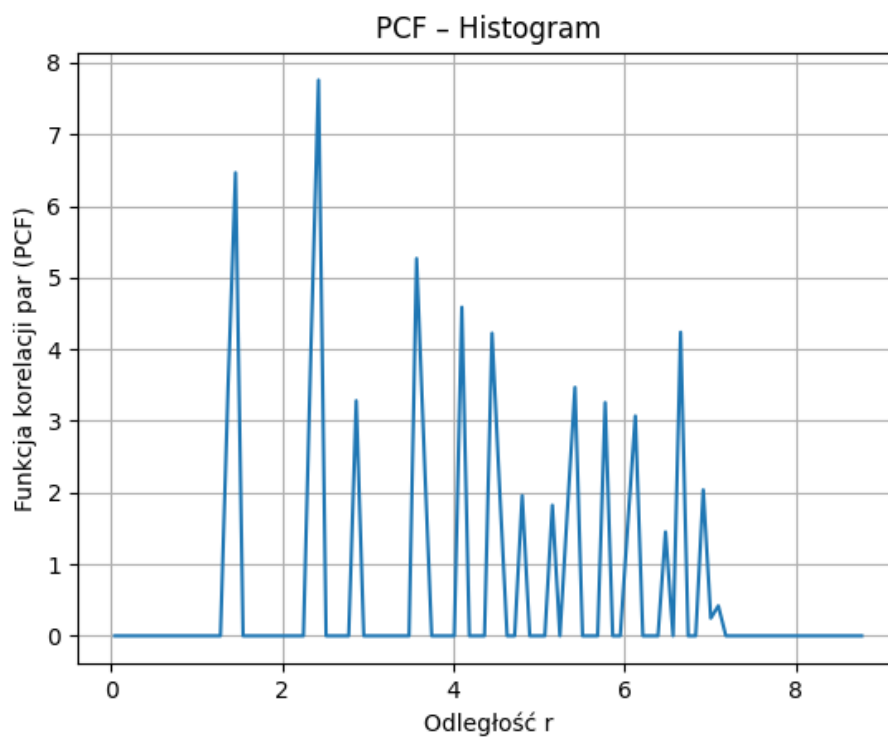
Rys 3. Wykres energii układu w zależności od iteracji.

Ruch atomów

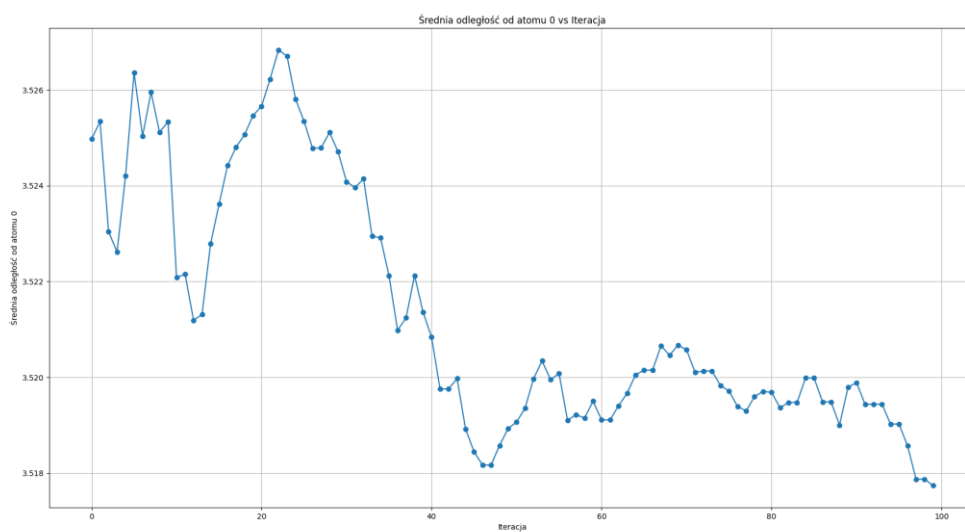
Iteracja: 99



Rys 4. Wykres fulerenu po 99 iteracjach.



Rys 5. Wykres funkcji korelacji par (i-j).



Rys 6. Zmiana średniej odległości od 0.

4. Wnioski

Wyniki analizy nie można uznać za całkowity sukces - nie zaobserwowano oczekiwanego powiększania się sfery (puchnięcia) czy zmian energii - jej poziom pozostaje stały. Zaobserwowane (z trudem) ruchy atomów nie spowodowały jednak znaczących zmian w układzie -

były one możliwe. Jako najważniejszą przyczynę początkowo uznano zbyt mocne ograniczenia na ruch atomów - stąd zwiększenie dozwolonego ruchu. Efektem był zauważalny (ale wciąż nieznaczny) ruch atomów w obrębie sfery. Bardzo wiele z wylosowanych poruszeń zostawało jednak odrzuconych - przykładowo w załączonych danych pomiędzy iteracją 0. a 1. przesunęło się tylko 10/60 atomów. Nie udało się znaleźć przyczyny braku zmian energii w układzie. Może to wynikać z błędów implementacji funkcji (jednakże przeszła ona test inicjalizujący poprawnie) lub nieprawidłowego modelu. Możliwe jest również, że uzyskane przesunięcia nie powodują znaczących zmian energetycznych. Na 6 pokazano zmiany średniej odległości atomów od środka układu. Widoczne są wahania, jednakże wartość ta nie ulega znaczącej zmianie, tj. fluktuacje są rzędu 0.1%. Może to świadczyć o osiągnięciu minimum energetycznego już na początku co sprawia, że zdecydowana większość proponowanych ruchów jest odrzucana - o ile nie jest to obrót po sferze.