

# Molekylær Dynamikk

Oblig 3

Øyvind Sigmundson Schøyen  
Kandidatnummer: 30

Avsluttande prosjekt i FYS3150



FYS3150 Computational Physics  
Universitetet i Oslo

1. desember 2014

## Samandrag

I dette prosjektet har me tatt for oss modellering av argon på atomært nivå. Me har vore interesserte i å lage eit program som skal lage ein atomstruktur etter eige ynskje. I tillegg har me ville sjå på korleis eit slikt system utvikler seg over tid og måle statistiske eigenskapar ved det. For å modellere eit så realistisk resultat innanfor det som er mogleg å køyre på ein pc har me utnytta cellelister for å auke hastigheita på programmet. For krafta har me nytta Lennard Jones potensialet og som integrator har me brukt Velocity Verlet-algoritma. Programma våre er objektorientert C++-kode med eit Python rammeverk som skal enklast mogleg køyre programmet vårt for forskjellige parametrar og plote verdiar. Me nyttar VMD for å visualisere atoma i rommet. All kjeldekode ligg på github.

Rett litt på denne...

<https://github.com/Schoyen/molecular-dynamics-fys3150>

# Innhold

<b>Introduksjon</b>	<b>3</b>
<b>Fysikken bak molekylær dynamikken</b>	<b>4</b>
Oppsett . . . . .	4
Face-Centered Cubic Lattice . . . . .	4
Maxwell-Boltzmann og fartsmoment . . . . .	4
Lennard Jones . . . . .	5
Statistiske målinger . . . . .	7
<b>Algoritmar</b>	<b>8</b>
Simulering av eit uendeleg stort system . . . . .	8
Periodiske randbetingelsar . . . . .	8
Avstand frå endepunkta . . . . .	8
<b>Struktur</b>	<b>10</b>
<b>Resultat</b>	<b>11</b>
<b>Feilestimat</b>	<b>12</b>

## Introduksjon

Oppgåva me er gjevne har gått ut på å modellere eit fysisk system samt bruke objektorientert programmering til å holde ein ryddig, oversiktlig, samt effektiv kode. I byrjinga er me gjeve ein kode som lagar 100 argon atom og gjer dei ein tilfeldig retning og hastighet. Gjeve lang nok tid vil atoma drive vekk. Me vil difor nytte “periodiske randbetingelsar” for å halde atoma i nærleiken. Grunna hastigheitar gjevne frå Maxwell-Boltzmann distribusjon vil systemet ha ein ikkje-null rørslemengde som me vil fjerne. Me vil deretter lage ein krystallstruktur kor me startar simuleringa av atoma. I eit slik lukka system vil total energien vere bevart, men grunna numerisk avrunding er det ikkje alltid dette held mål. Ein stabil alogritme som me vil nytte er “Velocity Verlet” som er ein symplektisk integrator. Me vil no byrje å måle statistiske eigenskapar som energi og temperatur. For å kunne køyre koden for store system vil me derimot utvikle ein kjappar algoritme når me rekner ut krafta mellom atompara. Dette løyser me med celledister. Til slutt, i fyrste del av prosjektet, legg me til ein termostat som let oss kontrollere temperaturen i systemet.

God lesning!

## Fysikken bak molekylær dynamikken

I denne delen av rapporten vil me sjå på dei forskjellige eigenskapane me måler i MD-koda vår. Eventuelle måleresultat vil bli vist i resultat-seksjonen.

### Oppsett

Systemet med atom me set opp krev nokre tilpassningar for å gje eit realistisk resultat.

#### Face-Centered Cubic Lattice

Det fyrste me vil gjere å plassera atom i ein krystallstruktur. For Argon vil me då nytte “face-centered cubic lattice” (FCC). Me plasserer fire og fire atom i ei einingscelle. Posisjonane til kvart atom vil vere gjeve ved

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_1 &= 0\mathbf{i} + 0\mathbf{j} + 0\mathbf{k}, \\ \mathbf{r}_2 &= \frac{b}{2}\mathbf{i} + \frac{b}{2}\mathbf{j} + 0\mathbf{k}, \\ \mathbf{r}_3 &= 0\mathbf{i} + \frac{b}{2}\mathbf{j} + \frac{b}{2}\mathbf{k}, \\ \mathbf{r}_4 &= \frac{b}{2}\mathbf{i} + 0\mathbf{j} + \frac{b}{2}\mathbf{k}.\end{aligned}$$

Her vil  $b$  vere ein konstant, me skal seinare sjå på korleis trykket er avhengig av denne.

#### Maxwell-Boltzmann og fartsmoment

Etter at atoma vert plasserte i einingscellene vil me gje dei ein liten starthastighet kor me nyttar Maxwell-Boltzmann distribusjon. Då vil

$$\mathbf{v} \propto \sqrt{T}.$$

Hastigheita til atoma vil bli fordelte tilfeldig i rommet. Resultatet er at systemet har eit ikkje-null fartsmoment. Før me byrjar å rekne ut nye posisjonar vil me fjerne dette fartsmomentet. Me vil då finne den totale hastigheita til systemet og trekke denne frå kvart atom.

$$\begin{aligned}\mathbf{V} &= \frac{1}{M} \sum_i^N m_i \mathbf{v}_i^{\text{før}}, \\ \mathbf{v}_i^{\text{etter}} &= \mathbf{v}_i^{\text{før}} - \mathbf{V}, \quad i \in [1, N],\end{aligned}$$

kor  $\mathbf{V}$  er den total hastigheita til systemet,  $N$  er antal atom,  $M$  er den totale massa til alle atoma summert opp. Dette bidrar til at systemet vårt ikkje har ein total hastighet, men heller står i ro.

## Lennard Jones

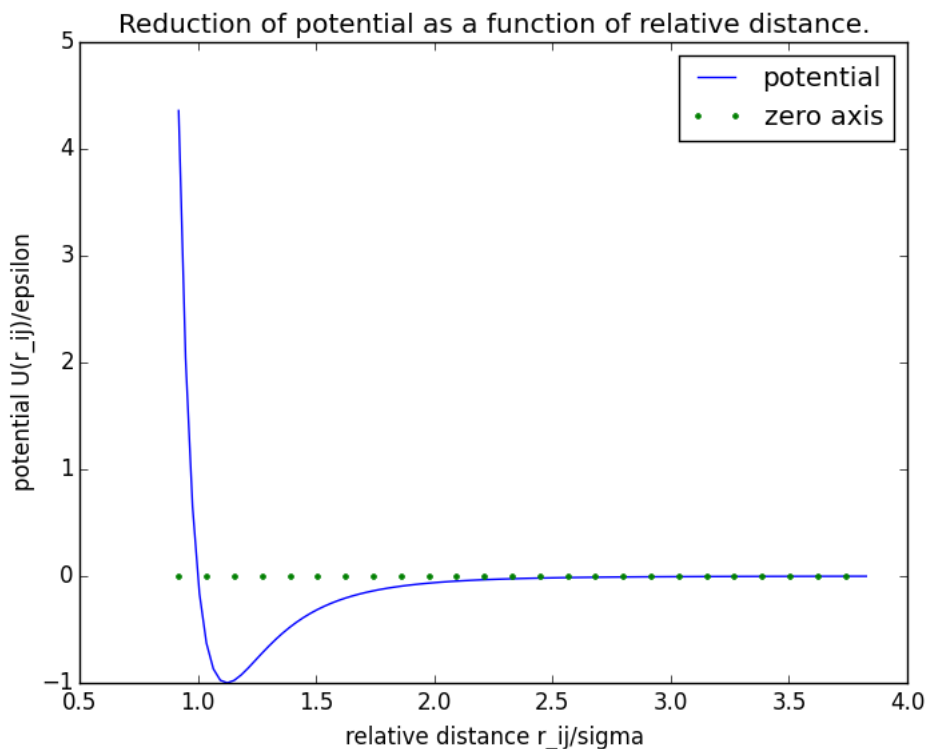
For å få ein fysisk effekt på systemet må me byrje å rekne ut krafta mellom atoma. Me nyttar Lennard Jones potensialet for å finne krafta mellom atompara. Lennard Jones har den eigenskapen at potensialet tek med den fråstøytande og den tiltrekkande krafta mellom para. Potensialet er gjeve ved

$$U(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

kor  $r_{ij}$  er avstanden frå atom  $i$  og  $j$ ,  $\sigma$  og  $\epsilon$  er konstantar som bestemmer kva distanse potensialet er null og kor djup potensialbrønnen skal vere. Me finn krafta ved å ta den negative gradienten til potensialet. Då får me

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{r}_{ij}) &= -\nabla U(r_{ij}) = -\frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \\ &= -4\epsilon \left[ 12 \left( \frac{\sigma^{12}}{r_{ij}^{14}} \right) - 6 \left( \frac{\sigma^6}{r_{ij}^8} \right) \right] \mathbf{r}_{ij}. \end{aligned}$$

Grunna dei høge potensane kan me sjå at denne krafta vil kjapt gå mot null. Denne eigenskapen gjer at me kan effektivisere koda vår ved berre å rekne ut krafta mellom atom kor avstanden mellom dei er innanfor ein radius  $r_{\text{cut}}$ . Eit plott over  $U/\epsilon$  mot  $r_{ij}/\sigma$  vil gje oss ein indikator kva tid krafta vil vere null.



Figur 1: I plottet kan me lett sjå kor dei tiltrekkjande og kor dei fråstøytande kreftene har sine styrker. Då krafta er gjeve som den negative gradienten til potensialet vil me kunne sjå at i det atoma kjem veldig nære einannan vil det virke ei kraftig fråstøyting ( $r_{ij}^{12}$ -delen) medan det for større avstand vil virke ei svakare, men med større rekkevidde, tiltrekkande kraft ( $r_{ij}^6$ -delen).

Frå figuren les me av

$$\frac{r_{\text{cut}}}{\sigma} \approx 2.5 \quad \Rightarrow \quad r_{\text{cut}} \approx 2.5\sigma.$$

Utanfor denne radiusen vil me ikkje rekne krafta mellom atompara.

## Statiske målinger



# Algoritmar

## Simulering av eit uendeleg stort system

### Periodiske randbetingelsar

Av mangel på moglegheit til å simulere eit uendeleg stort system for å få energibevaring, implementerer me periodiske randbetingelsar. Viss eit atom har ein posisjon som ligg utanfor storleiken på systemet vårt vil me flytte atomet slik at det kjem inn frå den andre sida av systemet. For eit stort system kan dette vere ei god tilnærming då det heile tida forsvinn atom ut frå eit lite område, men samstundes kjem det inn nye atom slik at tettheten er jamn. Dette vil og vere med på å gje oss bevaring av total energi då det ikkje går noko tap til vegger og liknande. Periodiske randbetingelsar vil vere gjeve ved formelen

$$\mathbf{r}_i = x_i \mathbf{i} + y_i \mathbf{j} + z_i \mathbf{k}, \quad i \in [1, N],$$

kor  $N$  er antal atom i systemet. Då vil kvar komponent i  $\mathbf{r}_i$  vere gjeve ved

$$x = \begin{cases} x + S_x, & x < 0 \\ x, & x \in [0, S_x) \\ x - S_x, & x \geq S_x \end{cases},$$

kor  $S_x$  er storleiken på systemet i  $x$ -retning og  $x$  er noverande posisjon for atomet. Me gjentek dette for dei to andre retningane og.

### Avstand frå endepunkta

Frå analogien ved bruk av periodiske randbetingelsar må me ta hensyn til at avstand mellom atompar ikkje nødvendigvis stemmer. Argumentet vårt er at atoma som ligg heilt i kanten av systemet har “tvillingar” som kjem inn frå andre sida på nøyaktig same tid og med dei same parametranne som seg sjølve. Når me då rekner avstand mellom atoma vil me sjekke om eigentleg ligg mykje nærare viss det eine atomet vert flytta over på den andre sida av systemet. Me kjem til å nytte “Minimum Image Criterion” for å sjekke om dette er oppfylt. Me definerer

$$\Delta \mathbf{R} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \quad i \neq j, \quad i, j \in [1, N],$$

som gjer oss avstanden mellom atoma slik det framstår i simuleringa. For å simulere eit uendeleg system vil me difor sjekke om denne oppfyller krava

$$\Delta \mathbf{R} = \Delta X \mathbf{i} + \Delta Y \mathbf{j} + \Delta Z \mathbf{k},$$

kor me har skrive  $\Delta \mathbf{R}$  på komponentform. Då får me

$$\Delta X = \begin{cases} \Delta X - S_x, & \Delta X > \frac{S_x}{2} \\ \Delta X, & \Delta X \in \left(-\frac{S_x}{2}, \frac{S_x}{2}\right] \\ \Delta X + S_x, & \Delta X \leq -\frac{S_x}{2} \end{cases}$$

## Struktur

## Resultat

## Feilestimat