

ФГОУ ВО УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б.Н.ЕЛЬЦИНА

ФИЗИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ

**ОТЧЁТ ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ №2**  
**«Моделирование атомной структуры реальных кристаллов»**

Студент:

Вялова С.А.

группа: ФТМ-170403

Преподаватель:

д.ф.-м.н., профессор

Мазуренко Владимир Владимирович

Консультант:

н.с.

Сотников Олег Михайлович

18 мая 2018 г.  
Екатеринбург.

# Содержание

<b>1. Моделирование атомной структуры реальных кристаллов</b>	<b>2</b>
1.1. Цель работы . . . . .	2
1.2. Теоретическая часть . . . . .	3
1.2.1. Потенциал Леннарда-Джонса . . . . .	3
1.2.2. Описание методов . . . . .	4
1.2.3. Разработка программной части . . . . .	5
1.2.4. Результаты моделирования . . . . .	6
1.3. Выводы . . . . .	9

## Глава 1

# Моделирование атомной структуры реальных кристаллов

### 1.1. Цель работы

Разработка программы для моделирования основного состояния двумерных решеток, в которых частицы взаимодействуют через потенциал Леннарда-Джонса. Рассмотрение квадратной и треугольной решетки с одинаковой плотностью атомов.

В ходе выполнения работы необходимо реализовать следующие пункты:

- Определить энергии треугольной и квадратной решеток при различных линейных размерах решеток;
- вычислить плотность системы в каждом случае;
- выяснить, какова зависимость плотности решетки от линейных размеров решетки;
- выяснить, энергия какой из рассматриваемых решеток меньше.

## 1.2. Теоретическая часть

### 1.2.1. Потенциал Леннарда-Джонса

Потенциал Леннарда-Джонса представляет собой простую модель парного взаимодействия неполярных молекул, описывающая зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. Потенциал был предложен Леннардом-Джонсом первоначально для исследования термодинамических свойств инертных газов. Наиболее часто используется так называемый (6-12)-потенциал Леннарда-Джонса, записанный в форме

$$U = 4 \cdot \varepsilon \cdot [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6], \quad (1.1)$$

где  $\varepsilon$  - глубина потенциальной ямы,  $\sigma$  - значение расстояния между частицами, при котором потенциал равен нулю. Шестая степень убывания отвечает электростатическому диполь-дипольному и дисперсионному притяжению; двенадцатая степень убывания потенциала моделирует достаточно жесткое отталкивание и выбрана из соображений математического удобства.

### 1.2.2. Описание методов

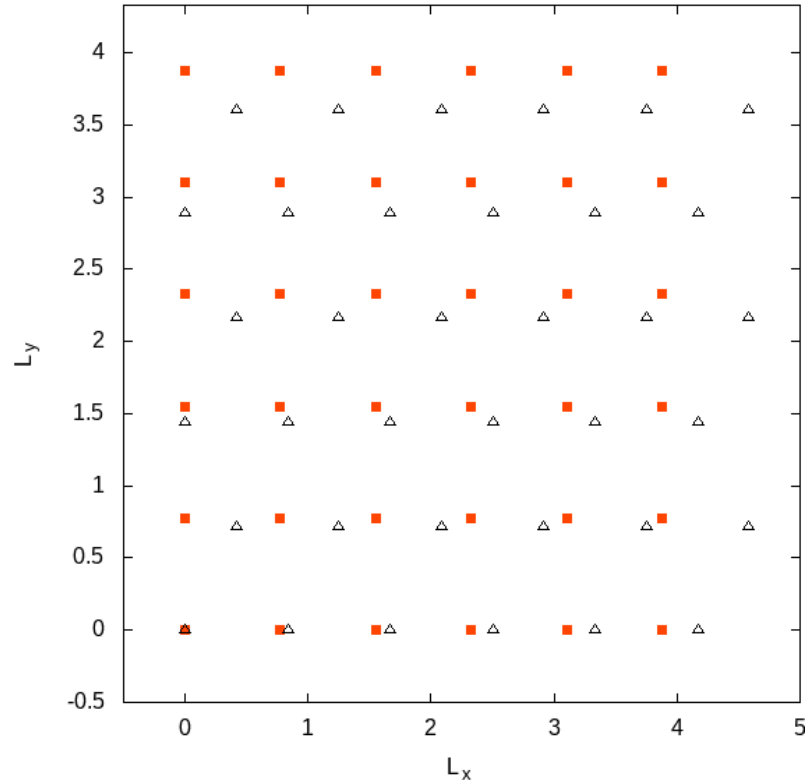
В ходе работы необходимо исследовать треугольные и квадратные решетки с различными линейными размерами. Пусть  $L_x$  - ширина треугольной решетки,  $n_c$  - число частиц в каждой строке или столбце. Столбцы треугольной решетки отстоят друг от друга на  $a = L_x/n_c$ , а каждую строку разделяет расстояние  $\frac{\sqrt{3}}{2}a$ . В каждой строке узлы смещены на  $frac{a}{2}$  относительно предыдущей строки. Высота треугольной решетки составляет  $L_y = \frac{\sqrt{3}L_x}{2}$ , а общее число частиц в системе составляет  $N = n_c^2$ . Параметры для квадратной решетки подбираются исходя из требования равенства плотностей треугольной и квадратной решеток. Таким образом, сторона квадратной решетки  $L = \sqrt{L_x \cdot L_y}$ .

Энергия решетки вычисляется через потенциал Леннарда-Джонса следующим образом:

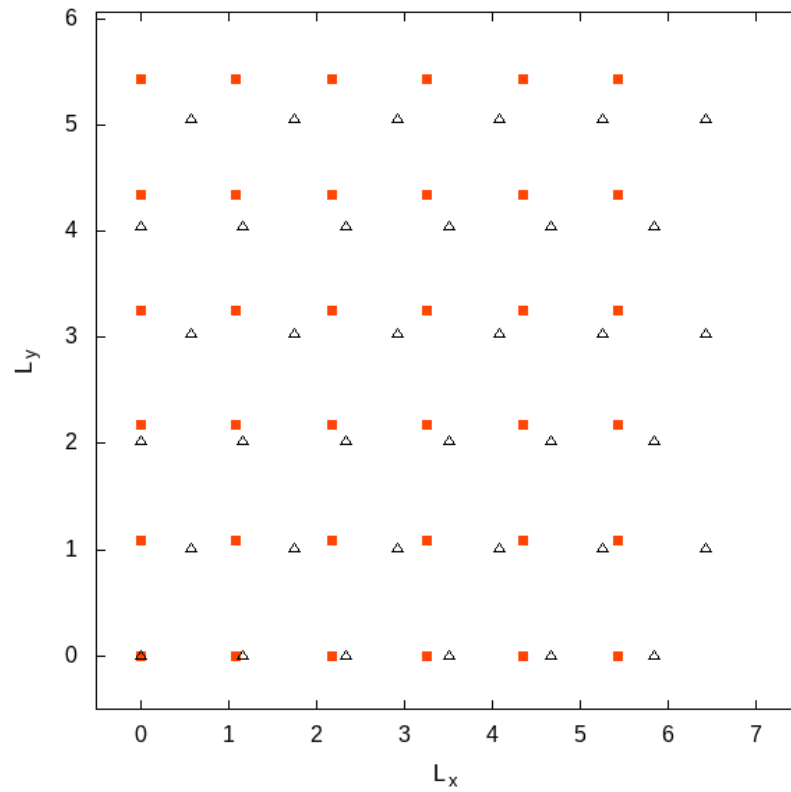
$$E = 4\varepsilon \sum_{i=1}^N \sum_{s=i+1}^N [(\sigma/\vec{r}_{is})^{12} - (\sigma/\vec{r}_{is})^6] \quad (1.2)$$

Плотность решетки вычисляется как частное числа частиц в решетке и полной площади решетки.

Характерный вид расположения атомов в треугольной и квадратной решетках для  $L_x = 5$  и  $L_x = 7$  представлен на рисунках 1.1 и 1.2.



**Рис. 1.1.** Расположение атомов в треугольной и квадратной решетках для  $L_x = 5$ .



**Рис. 1.2.** Расположение атомов в треугольной и квадратной решетках для  $L_x = 7$ .

### 1.2.3. Разработка программной части

Для решения поставленной задачи была разработана программа на языке C++. Задача программы - сгенерировать начальные значения координат для треугольной, квадратной решетки с заданными линейными размерами. Программа последовательно генерирует следующие типы решеток:

- квадратная,  $L_x = 5$
- квадратная,  $L_x = 7$
- треугольная,  $L_x = 5$
- треугольная,  $L_x = 7$

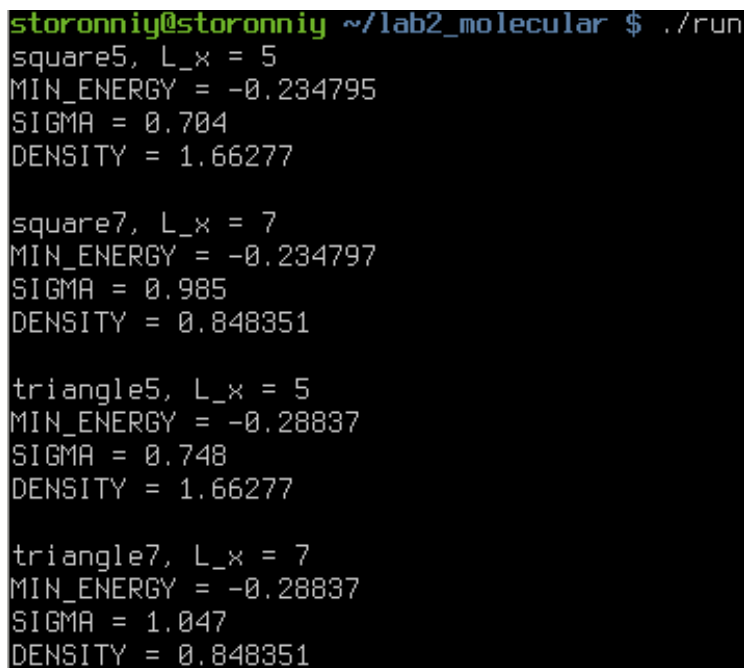
Далее в цикле считается энергия решетки для каждого значения параметра  $\sigma$  с шагом 0.001, вычисляется минимальное значение энергии решетки на интервале  $\sigma$  от 0 до 5 и в минимуме фиксируется значение  $\sigma$ . Значения энергии системы в зависимости от параметра  $\sigma$  на каждом шаге моделирования записываются в файл для построения соответствующих графиков зависимости. Для каждой решетки вычисляется плотность. Значения минимальной энергии, плотности, значения параметра  $\sigma$  в минимуме для каждой решетки выводятся в терминал.

При исследовании системы были использованы следующие входные данные:

- начальное значение параметра  $\sigma$ : 0;

- конечное значение параметра  $\sigma$ : 5;
- шаг по параметру  $\sigma$ : 0.001;
- значение параметра  $\varepsilon=0.0031$ ;
- линейный размер системы по горизонтали  $L_x = 5$ ;
- число частиц в строке/столбце  $n_c = 6$ ;
- число частиц в решетке  $N = n_c^2 = 36$ ;

Программа запускается из командной оболочки `bash`. Снимок экрана с выводом программы представлен на рисунке 1.3.



```
storonniy@storonniy ~/lab2_molecular $ ./run
square5, L_x = 5
MIN_ENERGY = -0.234795
SIGMA = 0.704
DENSITY = 1.66277

square7, L_x = 7
MIN_ENERGY = -0.234797
SIGMA = 0.985
DENSITY = 0.848351

triangle5, L_x = 5
MIN_ENERGY = -0.28837
SIGMA = 0.748
DENSITY = 1.66277

triangle7, L_x = 7
MIN_ENERGY = -0.28837
SIGMA = 1.047
DENSITY = 0.848351
```

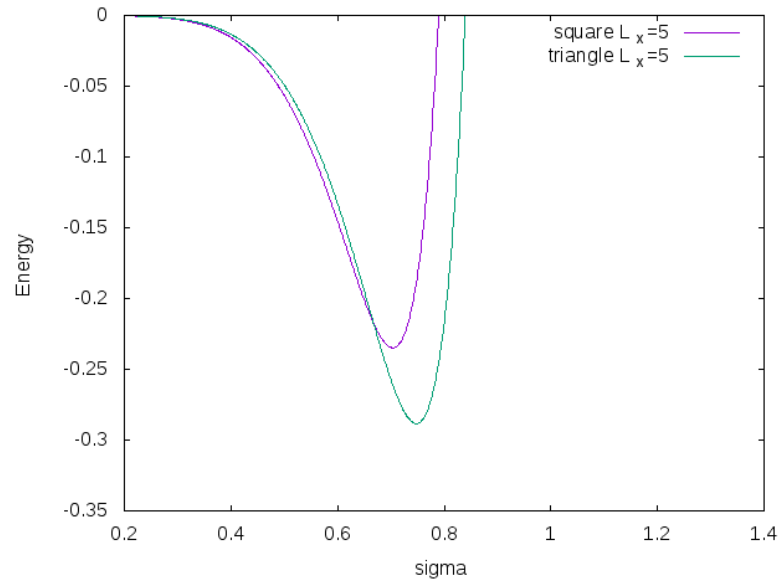
**Рис. 1.3.** Демонстрация выполняющейся программы.

Как видно из представленного вывода программы, плотности треугольной и квадратной решеток для каждого из исследованных параметров  $L_x$ , плотности треугольной и квадратной решеток, как и требовалось, равны при одинаковых параметрах  $L_x$ .

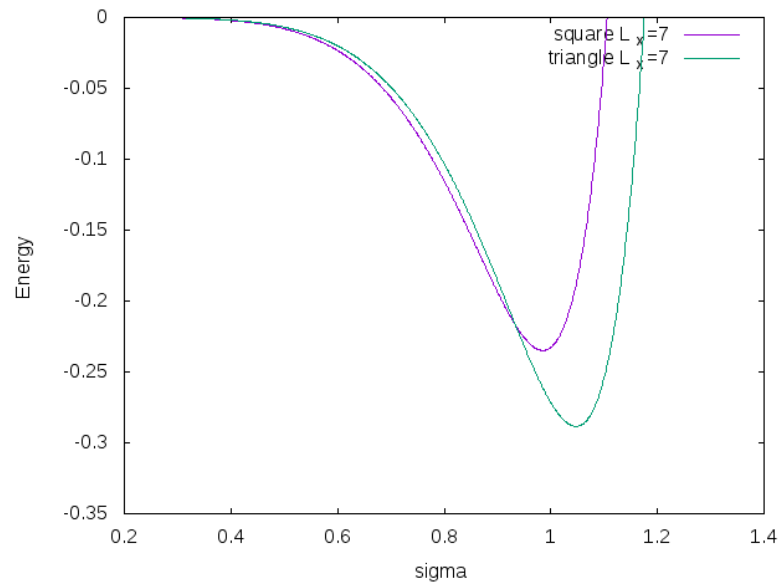
Затем необходимо включить динамику для квадратной решетки.

#### 1.2.4. Результаты моделирования

В результате моделирования, были получены графики зависимости энергии систем в зависимости от параметра  $\sigma$  для каждого значения  $L_x$ . Соответствующие зависимости представлены на рисунках 1.4 и 1.5.



**Рис. 1.4.** Графики зависимости энергии системы в зависимости от параметра  $\sigma$  для треугольной и квадратной решеток для  $L_x = 5$ .



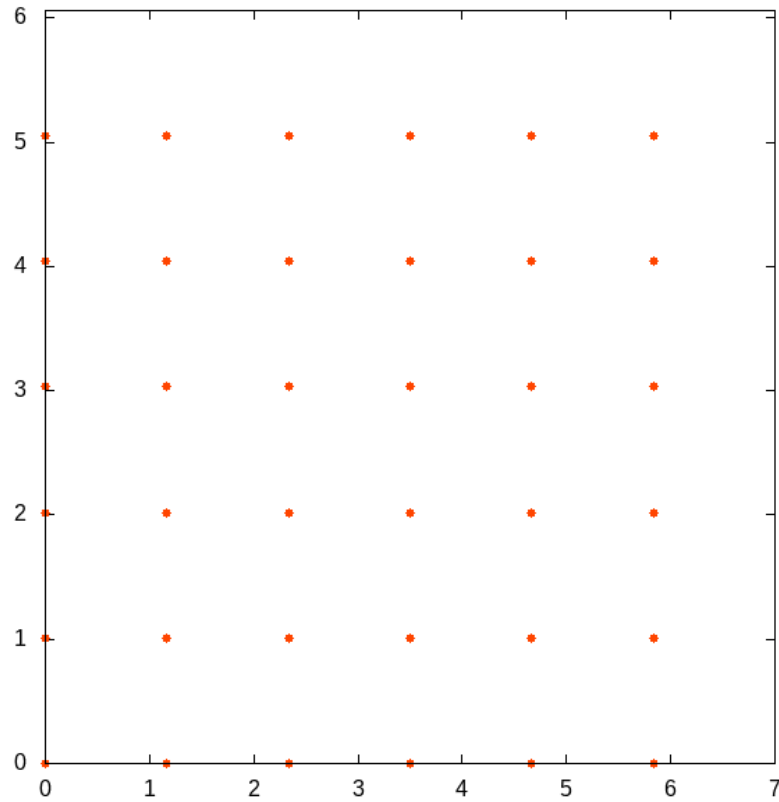
**Рис. 1.5.** Графики зависимости энергии системы в зависимости от параметра  $\sigma$  для треугольной и квадратной решеток для  $L_x = 7$ .

После вычисления параметров  $\sigma$  в минимуме энергии для каждой решетки необходимо проследить динамику систем частиц для квадратных решеток. Для этого необходимо воспользоваться видоизмененным программным кодом для лабораторной работы №1 (необходимо передать параметры  $L_x$  и  $L_y$  для периодических граничных условий и на вход подать найденные в ходе данной работы параметры  $\sigma$  в минимуме для квадратных решеток), в которой исследовалась динамика двумерной системы частиц, взаимодействующих через потен-



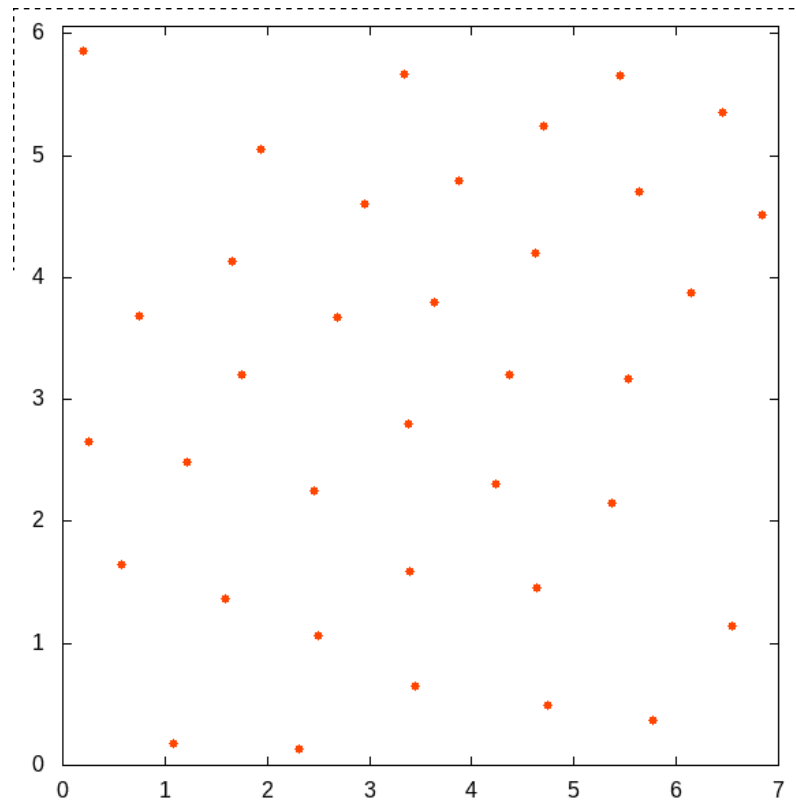
циал Леннарда-Джонса.

Характерный вид состояния системы в начальный момент времени и после некоторого количества шагов динамики системы представлены на рисунках 1.6 и 1.7.

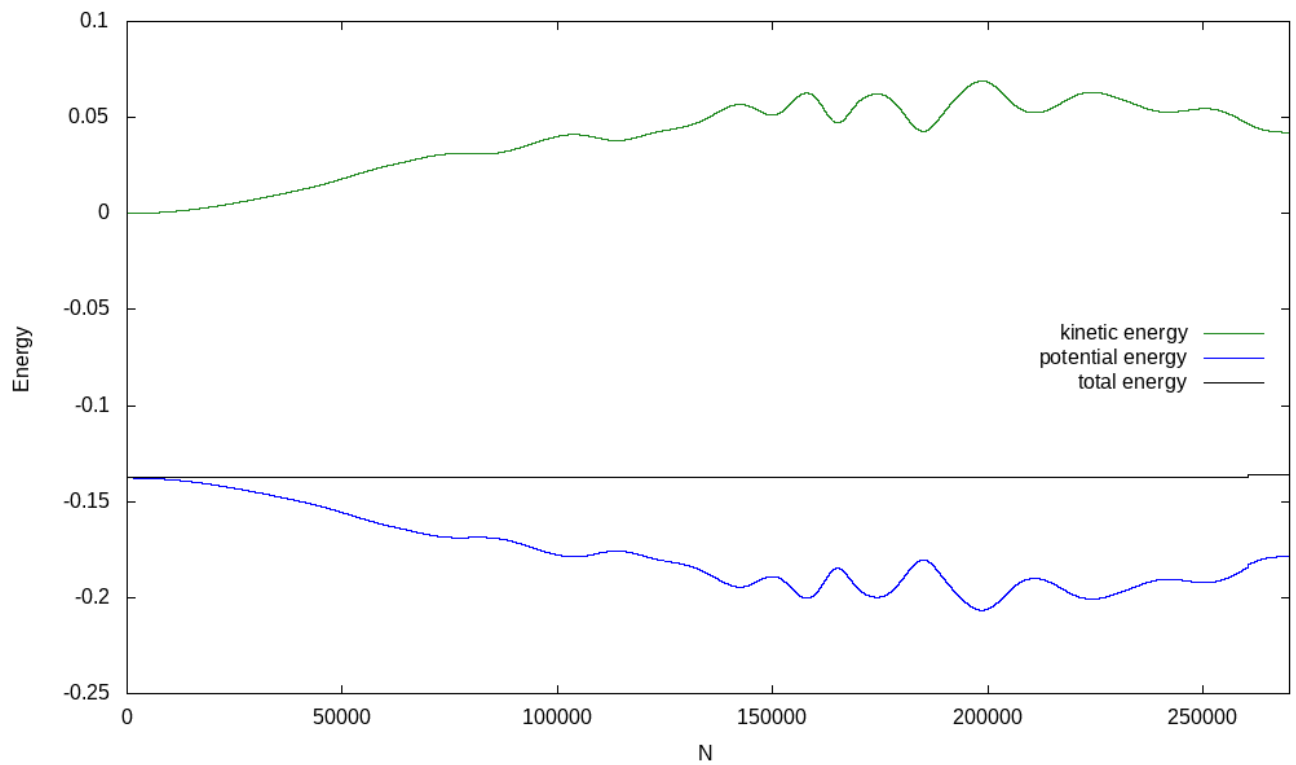


**Рис. 1.6.** Состояние системы в начальный момент времени для  $L_x = 7$ .

Из полученной динамики видно, что после некоторого числа шагов моделирования система приходит к некоторому равновесному состоянию с меньшей энергией, в котором стремится стабилизироваться. Система переходит из квадратного упорядочения к треугольному. Далее был построен график зависимости энергии системы от числа шагов моделирования, представленный на рисунке 1.8, из которого видно, что полная энергия системы сохраняется, а частицы системы, в попытке привести её в равновесное состояние, испытывают столкновения друг с другом.



**Рис. 1.7.** Состояние системы после некоторого количества шагов динамики системы для  $L_x = 7$ .



**Рис. 1.8.** График зависимости энергии системы от числа шагов моделирования для  $L_x = 7$ .

### 1.3. Выводы

В ходе данной работы была разработана программа, моделирующая основное состояние треугольной и квадратной решеток, взаимодействующих через потенциал Леннарда-Джонса. Моделирование было проведено для треугольных решеток с линейными размерами системы  $L_x = 5$  и  $L_x = 7$ ,  $L_y = \frac{\sqrt{3}}{2}L_x$  и квадратных решеток со стороной  $L = \sqrt{L_x \cdot L_y}$ , плотности которых равны при одинаковых параметрах  $L_x$ . После проведения расчётов были получены изображения, показывающие расположение частиц в системах, а также были построены и проанализированы графики зависимости энергии систем в зависимости от параметра  $\sigma$ . Значения  $\sigma$ , при которых энергия системы с квадратной конфигурацией минимальна, были зафиксированы и квадратные решетки были рассмотрены в динамике с данными значениями  $\sigma$ . Из полученных в ходе исследования результатов можно сделать вывод, что треугольная структура решетки является более предпочтительной, поскольку обладает меньшей энергией при том же значении  $\sigma$ .