

# Minimum energii klastrów Lennarda-Jonesa

Dawid Woś, Agnieszka Makulska

Styczeń 2021

## 1 Wstęp

Celem ćwiczenia było znalezienie minimum energii dla układu  $N$  punktów w przestrzeni trójwymiarowej, oddziałujących potencjałem Lennarda-Jonesa, który wyraża się wzorem:

$$V(r) = 4 \left( \frac{1}{r^{2a}} - \frac{1}{r^a} \right) \quad (1)$$

gdzie  $a=6$ ,  $r$  – odległość między punktami.

## 2 Opis ćwiczenia

Przeprowadzono minimalizację potencjału metodą sprzężonych gradientów. Dla każdej liczby  $N$  generowano losowy rozkład punktów, zawarty w kuli o promieniu  $1.1\sqrt{N}$ . Rozpoczynając od tego rozkładu, minimalizowano całkowitą energię potencjalną i znajdowano rozkład odpowiadający minimum. Ponadto obliczenia wykonano dla różnych wartości całkowitych parametru  $a$ , zaczynając od  $a = 1$  i stopniowo zwiększając wartość do  $a = 6$ . Przy kolejnych etapach obliczeń korzystano z rozkładu punktów otrzymanego dla poprzedniej wartości  $a$ . Taka metoda pozwoliła na otrzymanie dokładniejszych wyników niż samo wykonanie obliczeń dla  $a = 6$ . Otrzymane wyniki znajdują się w tabeli 1.

Tabela 1: Minimum energii otrzymane dla różnych liczb punktów  $N$ .

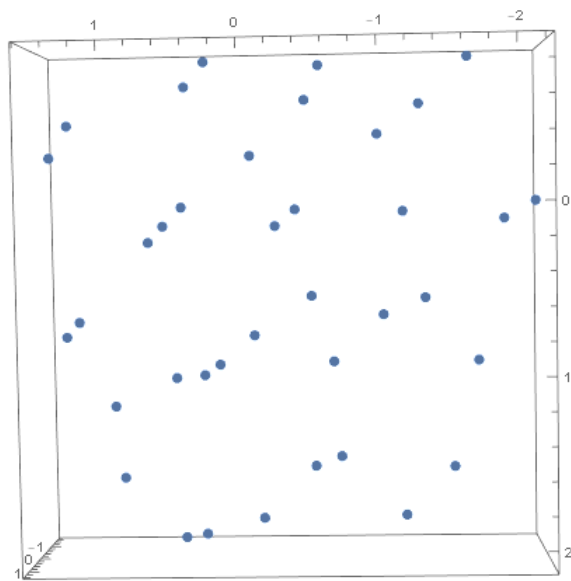
N	Minimum energii	N	Minimum energii	N	Minimum energii
2	-1.0000	39	-174.8120	76	-386.8620
3	-3.0000	40	-179.7810	77	-392.7280
4	-6.0000	41	-184.8410	78	-400.3090
5	-9.1038	42	-191.3240	79	-405.4350
6	-12.7121	43	-195.8160	80	-420.7950
7	-16.5054	44	-202.5930	81	-424.8440
8	-19.7653	45	-206.4570	82	-424.3960
9	-24.1134	46	-212.4580	83	-430.3060
10	-26.7717	47	-217.8250	84	-440.8100
11	-32.7660	48	-224.2150	85	-447.3780
12	-37.9676	49	-229.0930	86	-447.1210
13	-44.3268	50	-238.3740	87	-467.1930
14	-47.8452	51	-244.4040	88	-466.0550
15	-50.1713	52	-251.3290	89	-466.2490
16	-53.9362	53	-255.5650	90	-471.3390
17	-58.1726	54	-259.5030	91	-477.9990
18	-66.5309	55	-269.5590	92	-481.5520
19	-72.6598	56	-272.3180	93	-485.1880
20	-77.1770	57	-277.2870	94	-497.6730
21	-81.6515	58	-284.9380	95	-502.4710
22	-86.8098	59	-292.6400	96	-504.8740
23	-92.8445	60	-296.1110	97	-512.0460
24	-97.3488	61	-300.0190	98	-521.7810
25	-98.1725	62	-303.8360	99	-522.6360
26	-108.3160	63	-311.6130	100	-526.7570
27	-112.8250	64	-319.0340	101	-539.2900
28	-116.0020	65	-323.6930	102	-544.0950
29	-119.1910	66	-332.0740	103	-549.3350
30	-125.2740	67	-334.5600	104	-556.1030
31	-130.3970	68	-341.8890	105	-557.4780
32	-136.6990	69	-345.1860	106	-562.7380
33	-142.4280	70	-352.4810	107	-575.8510
34	-149.0100	71	-358.1050	108	-577.1050
35	-150.9680	72	-366.9080	109	-588.2720
36	-158.9500	73	-370.4290	110	-592.6210
37	-164.4300	74	-378.7100	111	-596.2360
38	-170.6630	75	-381.4160	112	-595.4630

Długość oraz dokładność obliczeń zależały od wartości parametrów użytych w metodzie sprzężonych gradientów. Te parametry to:

- $k$  – długość przesunięcia podczas pojedynczej iteracji,
- $\epsilon$  – bliska zera wartość gradientu energii, dla której program przerywał iteracje,
- limit iteracji – maksymalna liczba iteracji dla danej liczby punktów, równa  $1000000/N$ .

Zwiększanie limitu iteracji oraz zmniejszenie parametrów  $k$  i  $\epsilon$  pozwalało na uzyskanie większej dokładności wyników, ale wydłużało czas obliczeń.

Rysunek 1 przedstawia układ punktów odpowiadający minimum energii -170.6630, otrzymanemu dla  $N = 38$ . Nie udało się zaobserwować symetrii. Zwiększenie dokładności obliczeń powinno umożliwić otrzymanie oczekiwanego rozkładu.



Rysunek 1: Układ punktów odpowiadający minimum energii dla  $N = 38$ .

### 3 Podsumowanie

Udało się zrealizować cel ćwiczenia i znaleźć minima potencjału Lennarda-Jonesa dla rozkładów  $N$  punktów, dla  $N$  między 2 a 112. Niektóre ze znalezionych wartości różnią się od wartości oczekiwanych, co jest szczególnie widoczne dla dużych  $N$ . Można wyznaczyć minima z większą dokładnością, zwiększając odpowiednie parametry metody sprzężonych gradientów, ale powoduje to wydłużenie czasu obliczeń. Ponadto dla dużej liczby cząstek ( $N > 37$ ), całkowita energia ma dużą ilość minimów lokalnych. Wobec tego końcowy wynik istotnie zależy od położeń wylosowanych na samym początku punktów wewnątrz kuli o promieniu  $1.1\sqrt{N}$ .

Wielokrotne powtórzenie obliczeń powinno więc pozwolić na wyznaczenie minimum z większą dokładnością.

## Literatura

[1] *Oczekiwane wartości minimów energii*