

Молекулярная динамика

Этап 1

Асеинова Е.В.; Бармина О.К.; Горбунова Я.М.; Евсеева Д.О.; Исаханян Э.Т.

2022 Feb 24th

RUDN University, Moscow, Russian Federation

Метод молекулярной динамики рассматривает поведение вещества на микроуровне — мы наблюдаем за движением отдельных молекул. При этом мы хотим понять поведение сложной многочастичной системы. Применение данного метода даже к небольшим системам дает много для понимания наблюдаемых свойств газов, жидкостей и твердых тел.

Уравнения молекулярной динамики

Влияние молекул друг на друга описывается потенциалом взаимодействия U .

Мы будем рассматривать простейший случай - парное взаимодействие:

$$U_{ij} = U(r_{ij}),$$

где

$$r_{ij} = |r_i - r_j|$$

Движение частиц описывается вторым законом Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i$$

Алгоритм Верле

Также будем использовать алгоритм Верле в скоростной форме:

$$r_i^{n+1} = r_i^n + v_i^n * \delta t + a_i^n * \frac{\delta t^2}{2}$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{1}{2}(a_i^n + a_i^{n+1})\delta t$$

Здесь верхние индексы обозначают номер шага по времени

Критерием для выбора шага по времени может служить условие сохранения полной энергии системы:

$$E = \sum_1 \frac{m_i v_i^2}{2} + \sum_{i < j} U_{ij}$$

Потенциал Леннард-Джонса

$$U_{LJ} = \varepsilon \left(\left(\frac{b}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{b}{r} \right)^6 \right)$$

Нас интересует внутреннее состояние системы частиц. Из принципа относительности следует, что равномерное поступательное движение системы как целого не влияет на ее внутренние свойства. Такое движение можно исключить, задав суммарный импульс системы равным нулю.

Чтобы соотносить результаты расчета со свойствами гораздо большей системы, необходимо задать периодические граничные условия.

Выводы

Задача нашего проекта заключается в написании программы двумерной молекулярной динамики.

Для этого мы:

- задаем начальные условия с нулевым суммарным импульсом частиц
- задаем периодические граничные условия
- подбираем подходящий шаг по времени
- проверяем сохранение полной энергии и импульса