

Käyttöohje
Ohjelmoinnin harjoitustyö
Jani Anttila
012367294

Molekyylidynamiikka

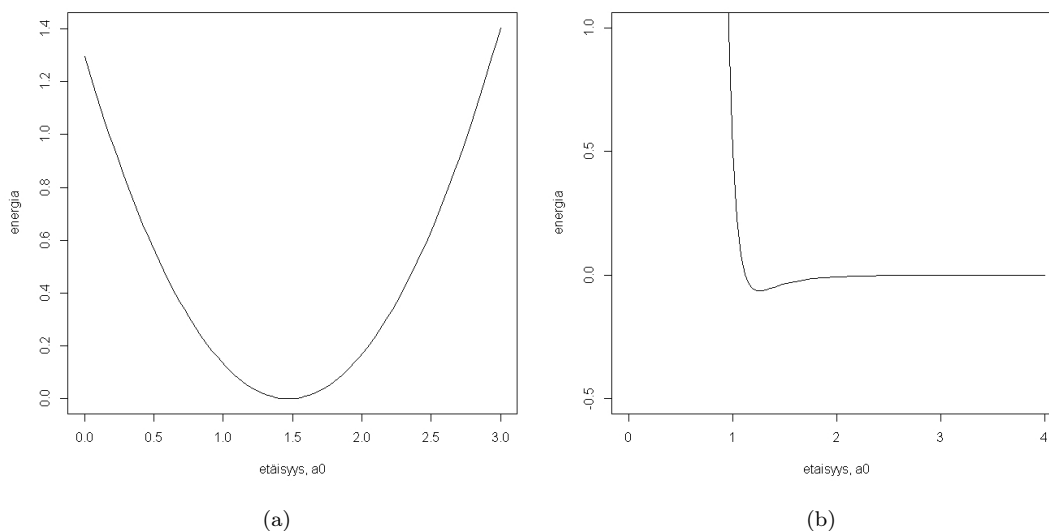
Molekyylidynamiikkasimulaatioiden tarkoituksena on mallintaa molekyylien liikettä ja tiloja klassisen mekaniikan lakien mukaan. Simulaatioproseduuri on pohjimmiltaan hyvin yksinkertainen: asetetaan pistemäisiksi approksimoituja atomeja tietyn kokoiseen tilaan ja simuloidaan sijaintien muutoksia ajassa laskemalla joka aika-askeleella ensin kaikkiin atomeihin vaikuttavat voimat ja sitten siirtämällä atomeja uusiin sijainteihin voimien mukaisesti. Molekyylidynaamisesta simulaatiosta voidaan laskea kappaleiden liike-energioita, potentiaalienergioita ja verrata näitä mittauksiin. Pedagogisessa mielessä yksi tärkeä tulos simulaatioista on liikkeen visualisointi, joka vaikuttaa käsitykseen prosesseista.

Ohjelman lähtökohdat

Tässä harjoitustyössä tehty ohjelma simuloi muutaman vetykaasumolekyylin liikettä pienessä tilassa. Suurimmillakaan käyttäjän antamilla parametreilla laskenta-aika ei ole kovin suuri. Vety-molekyylit sisältävät kaksi vetyatomia ja niiden välisen sidosvoiman, joka estää atomeja kulkemasta liian kauas toisistaan tai liian lähelle toisiaan. Tämän lisäksi simulaatiossa otetaan huomioon molekyylienväliset interaktiot asettamalla eri molekyylien atomien välille voima, joka hylkii liian lähellä olevia kappaleita. Sidosvoimaa mallinnetaan yksinkertaisena harmonisena potentiaalina (kuva) ja molekyylienvälistä interaktiota Lennard-Jones -potentiaalilla (kuva). Kovia törmäyksiä simulaatiossa tapahtuu ainoastaan simulaatioalueen eli laatikon reunoista.

Käyttäjän syöte

Käyttäjä voi valita simulaatiossa neljä parametria: simulaatioalueen eli laatikon koon, vety-molekyylien lukumäärän, simulaation tarkkuuden ja simulaation pituuden. Ohjelmassa käytetty pituusyksikkö on *bohr* $\approx 52,94$ pm. Laatikon koko vaikuttaa siihen kuinka monta molekyyliä laatikkoon maksimissaan mahtuu. Ohjelma arvioi tätä sisäisesti olettaen että molekyylit tarvitsevat tietyn määrän tilaa ja ilmoittaa jos käyttäjän haluama molekyylimäärä on liian iso suhteessa laatikon kokoon. Suuressa molekyyliitiheydessä voisi muuten ilmetä vakavia ongelmia numeerisen tarkkuuden kanssa. Molekyylien suurin maksimimäärä on asetettu kolmeenkymmeneen laskenta-ajan rajoittamiseksi.



Kuva 1: Simulaatiossa käytetyt potentiaalit: a) sidosvoiman harmoninen potentiaali ja b) molekyylienvälinen Lennard-Jones -potentiaali.

Simulaation tarkkuutta ja simulaation pituutta asetettaessa pitää huomioida näiden suhde. Simulaation aikayksikkö on femtosekunti. Simulaation tarkkuus eli aika-askeleen pituus tarkoittaa kuinka monta askelta simulaatio suorittaa yhden femtosekunnin simulointiin. Simulaation pituus tarkoittaa kuinka monta askelta yhteensä simuloidaan. Aika-askeleen pituudella 0,1 tarvitaan 10000 askelta yhden pikosekunnin simuloimiseen. Aika-askeleen pituudella 0,5 sama askelmäärä tuottaa viisi pikosekuntia simulaatiota.

Simulaation tarkastelu

Ohjelma piirtää ikkunan, jonka oikeanpuoleisessa paneelissa on mustalla taustalla merkittynä liike-energian keskiarvo valkoisilla pisteillä ja potentiaalienergian keskiarvo punaisilla pisteillä ajan suhteen. Tästä voi silmämääräisesti arvioida simulaation numeerisen tarkkuuden riittävyyttä. Liike- ja potentiaalienergian summan pitäisi pysyä vakiona, eli pisteiden summan pitäisi pysyä suunnilleen samassa tasossa koko ajan, eli vaaka-asken pituudelta.

Oikeanpuoleisesta paneeleista voi seurata molekyylien liikettä animaationa. Nappi Käynnistä kytkee animaation päälle ja Pysäytä pois. Animaatio alkaa alusta päästessään loppuun. Kolmiulotteisuutta havainnollistetaan piirtämällä syvyysakselilla kauempana olevat atomit pienempinä kuin lähellä olevat.

Simulaatio tuottaa automaattisesti kolme tekstitiedostoa, jotka sisältävät atomien paikat, liike-energian ja potentiaalienergian kunakin ajan hetkenä. Näiden nimet ovat 'paikat.txt', 'le.txt' ja 'pe.txt'. Ensimmäinen sarake sisältää aina ajan. Paikkatiedostossa ensimmäisen molekyylin ensimmäisen atomin x-, y- ja

z-koordinaatit ovat sarakkeilla 2, 3 ja 4, ja ensimmäisen molekyylin toisen atomin x-, y- ja z-koordinaatit sarakkeilla 5, 6 ja 7. Muiden molekyylien atomien paikat ovat seuraavilla sarakkeilla samaan tapaan. Energiatallenteissa ei tarvita koordinaatteja erikseen, vaan kullekin molekyylille on kaksi saraketta, yksi kummallekin atomille.

Ruudulle tulostuu myös liike-energian perusteella laskettu vetymolekyylikaasun keskimääräinen lämpötila simulaation lopussa.

Ohjelman kehitysideoita

Potentiaalienergian laskennassa on mahdollisesti jokin ongelma, sillä sen keskiarvo näyttäisi vaihtelevan hieman eri skaalalla kuin liike-energia. Toistaiseksi ohjelma simuloi vain vetykaasumolekyyliä. Muiden kaksiatomisten molekyylien simulointi olisi mahdollista pienellä vaivalla lisäämällä molekyyli-rajapinnan täyttäviä molekyyli-luokkia. Useat luokat olettavat molekyylien ovat kaksiatomisia, joten useampi-atomisten molekyylien lisääminen vaatisi hieman enemmän vaivaa. Tällöin olisi myös välttämätöntä lisätä si-doskulmia mallintavia voimavaikutuksia. Animaatiota voisi tehdä havainnollisemmaksi piirtämällä atomit eri värillä riippuen liike-energiasta. Suurempi molekyyli-määrä mahdollistaisi liike-energioiden jakauman tarkastelun, joka olisi myös hyvin mielenkiintoinen lisä.