

Modelowanie struktury fullerenów metodą symulowanego wyżarzania

Metody Monte Carlo w fizyce
Nanoinżynieria materiałów

Łukasz Ruba



Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

8 maja 2024

Spis treści

Cel ćwiczenia	3
1 Wstęp teoretyczny	3
1.1 Potencjał Brennera	3
1.2 Funkcja korelacji par	4
1.3 Algorytm symulowanego wyżarzania	4
2 Metodyka	5
3 Wyniki	6
3.1 Model podstawowy	6
3.2 Model rzeczywisty	7
3.3 Model optymalny	8
3.4 Energia wiązania struktury n-atomowej	9
3.5 Różne parametry modelu optymalnego	11
4 Wnioski	13
Literatura	14

Cel ćwiczenia

Celem ćwiczenia było wykonanie symulacji tworzenia się powierzchniowych struktur węglowych za pomocą metody symulowanego wyżarzania. Modelowanie wykonano przy użyciu potencjału Brennera opisującego konfigurację przestrzenną 2D i 3D struktur atomów węgla.

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Potencjał Brennera

Potencjał Brennera, podobnie jak potencjał Lennarda-Jonesa, opisuje oddziaływania dwuciałowe przy zawarciu informacji o liczbie aktualnie zawartych wiązań atomowych. Pozwala to na tworzenie struktur w których węgiel nie będzie wiązał się z więcej niż czterema innymi węglami. Całkowitą energię potencjalną układu opisuje wyrażenie:

$$V_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n V_i, \quad (1)$$

gdzie V_i to energia oddziaływania i -tego atomu z najbliższymi sąsiadami i wyraża się jako:

$$V_i = \sum_{j=1 \neq i}^n f_{cut}(r_{ij}) [V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} V_A(r_{ij})]. \quad (2)$$

Funkcja $f_{cut}(r)$ ze wzoru 2 pozwala ograniczyć zasięg przestrzenny oddziaływań do lokalnego otoczenia atomu. Narzucamy jej warunki:

$$f_{cut}(r) = \begin{cases} 1, & r \leq R_1, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{r - R_1}{R_2 - R_1} \pi \right) \right], & R_1 \leq r \leq R_2, \\ 0, & r > R_2, \end{cases} \quad (3)$$

Wyraz $V_R(r)$ określa wielkość potencjału odpychania dwóch atomów, a wyraz $V_A(r)$ to energia ich przyciągania:

$$V_R(r) = \frac{D_e}{S-1} \exp \left[-\sqrt{2S} \lambda (r - R_0) \right], \quad (4)$$

$$V_A(r) = \frac{D_e S}{S-1} \exp \left[-\sqrt{\frac{2}{S}} \lambda (r - R_0) \right]. \quad (5)$$

Czynnik skalujący potencjał przyciągania \bar{B}_{ij} liczymy jako średnią wyrazów opisujących krotkość wiązania:

$$\bar{B}_{ij} = \frac{B_{ij} + B_{ji}}{2}. \quad (6)$$

Wyraz B_{ij} oblicza się poprzez zdefiniowanie w pierwszej kolejności kosinusa kąta między trzema atomami:

$$\cos \theta_{ijk} = \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{r}_{ik}}{r_{ij} r_{ik}}, \quad (7)$$

którego wartość wykorzystuje się do obliczenia funkcji kąta pomiędzy atomami i - j oraz i - k [2]:

$$g(\theta_{ijk}) = a_0 \left[1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + (1 + \cos \theta_{ijk})} \right]. \quad (8)$$

Stałe a_0 , c_0 i d_0 są określone i znane dla potencjału Brennera. Wartość funkcji g potrzeba jest do obliczenia parametru ζ określającego oddziaływanie i -tego atomu ze wszystkimi pozostałymi k atomów:

$$\zeta_{ij} = \sum_{k=1 \neq i, j}^n f_{cut}(r_{ik}) g(\theta_{ijk}), \quad (9)$$

żeby finalnie otrzymać czynnik skalujący B_{ij} :

$$B_{ij} = (1 + \zeta_{ij})^{-\delta}. \quad (10)$$

Analogicznie liczony jest czynnik B_{ji} przy odwróceniu wskaźników i - j .

1.2 Funkcja korelacji par

Funkcja korelacji par (*eng. pair correlation function, PCF*) określa gęstość prawdopodobieństwa znalezienia innego atomu w odległości r od atomu położonego w początku układu współrzędnych. Można funkcję tą wyrazić jednak w taki sposób, aby reprezentowała ona formowanie się wieloatomowej cząstki poprzez badanie korelacji przestrzennych pomiędzy atomami. Wzór opisujący tak zdefiniowaną funkcję PCF wyraża się jako:

$$PCF(r) = \frac{\frac{2\Omega}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j>i}^n \delta(r - r_{ij})}{d\Omega}, \quad (11)$$

gdzie: $\delta(r)$ to delta Diraca, Ω to objętość obszaru symulacji. Rozważany problem w zasadzie jest dwuwymiarowy, co oznacza, że Ω można wyrazić jako:

$$\Omega = 4\pi r_{sr}^2, \quad (12)$$

gdzie r_{sr}^2 to średnia odległość atomów od środka układu współrzędnych. Czynniki $d\Omega$ możemy wyrazić jako pole powierzchni w pierścieniu o promieniu r i szerokości dr :

$$d\Omega = 2\pi r dr. \quad (13)$$

PCF wyrażone w taki sposób nie nadaje się dla obliczeń numerycznych, dlatego deltę Diraca zastępuje się histogramem przy pomocy określenia średniej odległości atomów od środka jako:

$$r_{sr} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i. \quad (14)$$

Na tej podstawie maksymalny zakres histogramu ustawia się na sztywno jako:

$$r_{max} = 2.5 \cdot r_{sr}. \quad (15)$$

Dzięki temu można określić szerokość M przedziałów histogramu jako:

$$\Delta r = \frac{r_{max}}{M}. \quad (16)$$

1.3 Algorytm symulowanego wyżarzania

Jako, że rozpatrywane struktury są okrągłe, położenie początkowe każdego atomu najlepiej losować w układzie sferycznym:

$$r_i = r_{start}, \quad (17)$$

$$\phi_i = 2\pi \cdot U(0, 1), \quad (18)$$

$$\theta_i = \pi \cdot U(0, 1). \quad (19)$$

Istotnymi wartościami z punktu widzenia symulacji są odległości pomiędzy atomami, które obliczyć należy ze współrzędnych kartezjańskich. W tym celu stosuje się transformację:

$$x_i = r_i \sin \theta_i \cos \phi_i, \quad (20)$$

$$y_i = r_i \sin \theta_i \sin \phi_i, \quad (21)$$

$$z_i = r_i \cos \theta_i. \quad (22)$$

W każdej iteracji algorytmu wyżarzania podejmuje się próbę losowego przemieszczenia każdego atomu ze struktury. W tym celu używany jest algorytm Metropolis, który polega na:

1. wylosowaniu przesunięć:

$$\Delta r = r_i(2U_1(0, 1) - 1)w_r, \quad (23)$$

$$\Delta \phi = \phi_i(2U_2(0, 1) - 1)w_\phi, \quad (24)$$

$$\Delta \theta = \theta_i(2U_3(0, 1) - 1)w_\theta, \quad (25)$$

2. sprawdzeniu czy nowe wartości kątów nie wychodzą poza zakresy $\phi \in (0, 2\pi)$, $\theta \in (0, \pi)$, a jeżeli tak to zastosować odpowiednie przesunięcia
3. obliczeniu energii dla aktualnie przesuwanego atomu w stanie sprzed przesunięcia i po nim,

4. obliczeniu prawdopodobieństwa akceptacji nowego stanu:

$$p_{acc} = \min\{1, \exp[-\beta(V_i^{new} - V_i^{old})]\}, \quad (26)$$

5. wylosowaniu zmiennej losowej $U_4(0, 1)$, która definiuje na podstawie prawdopodobieństwa akceptacji, czy udało się przesunąć dany atom, czy jego położenia wraca do pozycji sprzed przesunięcia.

Wartości parametrów w_r , w_ϕ , w_θ są ustalone odgórnie na początku symulacji, zaś parametr β oblicza się jako:

$$\beta = \beta_{min} + \left(\frac{it}{it_{max}}\right)^p (\beta_{max} - \beta_{min}). \quad (27)$$

W podejściu klasycznym β związana jest z temperaturą jako $\frac{1}{k_B T}$, jednak w kontekście symulacji wyraża się ją na podstawie ilości wykonanych iteracji it w stosunku do maksymalnej liczby iteracji it_{max} . Ułamek ten jest skalowany poprzez wykładnik p określający szybkość zmiany wartości β .

Po wykonaniu etapu pojedynczych przemieszczeń, należy zastosować globalną zmianę odległości wszystkich cząsteczek od środka układu współrzędnych. Przebiega ona w następujący sposób:

1. losuje się zmienną losową $U_1(0, 1)$,
2. na jej podstawie dokonuje się zmiany odległości każdego atomu od środka układu współrzędnych:

$$r_i = r_i[1 + W_{all}((2U_1 - 1))], \quad (28)$$

3. po przesunięciu wszystkich atomów oblicza się maksymalną energię układu oraz porównuje się ją z całkowitą energią sprzed przesunięcia, wyznaczając w ten sposób prawdopodobieństwo akceptacji nowego stanu:

$$p_{acc} = \min\{1, \exp[-\beta(V_{tot}^{new} - V_{tot}^{old})]\}, \quad (29)$$

4. losuje się zmienną losową $U_2(0, 1)$, której wartość decyduje o akceptacji lub odrzuceniu nowego stanu.

W algorytmie wyżarzania w każdej iteracji wykonuje się przedstawione powyżej czynności, zaś uzyskane stany końcowe, tj. nowe położenia atomów, stanowią parametry startowe kolejnej iteracji.

2 Metodyka

Opisany we wstępie teoretycznym (1) algorytm wyżarzania zaimplementowano w kodzie napisanym w języku *C++*. W trakcie trwania każdej symulacji zbierano informację na temat przestrzennego ułożenia atomów, wartości funkcji PCF, zmianie średniej odległości atomów od środka układu współrzędnych i energii układu.

Najpierw wykonano trzy symulacje dla 60 atomów węgla. W pierwszej nie limitowano ilości wiązań poszczególnych atomów i wartość położenia r każdego atomu startowała od wartości 3.5 Å. W podejściu drugim narzucono ograniczenie 4 wiązań dla atomu, poprzez sprawdzanie warunku:

$$\text{if } (\cos \theta_{ijk} > 0) \text{ then } \zeta_{ij} = 10. \quad (30)$$

W podejściu trzecim zadano wartość r_{start} równą 2.5 Å oraz zachowano warunek limitu 4 wiązań dla pojedynczego atomu.

Kolejnym wykonanym eksperymentem było obliczenie wartości energii pojedynczego wiązania w zależności od ilości atomów tworzących strukturę. Wartość energii wiązania wyznaczono ze wzoru:

$$V_n = \frac{|V_{tot}^n|}{n}, \quad (31)$$

gdzie V_{tot}^n to energia całkowita układu na końcu symulacji dla n atomów.

Przyjęto następujące parametry dla każdej symulacji:

- | | | | |
|-------------------------------|--------------------------------------|-------------------------|----------------------------------|
| • $R_0 = 1.315 \text{ \AA}$, | • $\lambda = 1.5 \text{ \AA}^{-1}$, | • $n = 60$, | • $w_r = 10^{-4}$, |
| • $R_1 = 1.70 \text{ \AA}$, | • $\delta = 0.80469$, | • $\beta_{min} = 1$, | • $w_\phi = 5 \cdot 10^{-2}$, |
| • $R_2 = 2.00 \text{ \AA}$, | • $a_0 = 0.011304$, | • $\beta_{max} = 100$, | • $w_\theta = 5 \cdot 10^{-2}$, |
| • $De = 6.325 \text{ eV}$, | • $c_0 = 19$, | • $p = 2$, | • $W_{all} = 10^{-4}$, |
| • $S = 1.29$, | • $d_0 = 2.5$, | • $it_{max} = 10^5$, | • $M = 100$. |

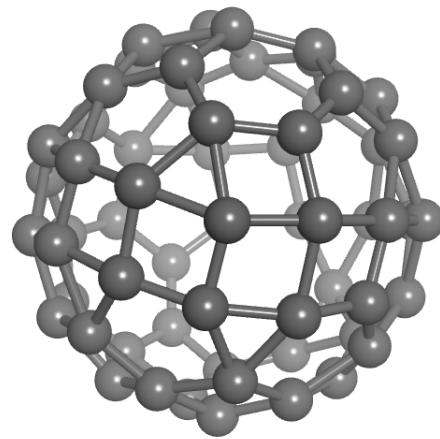
W ostatniej części sprawozdania zaprezentowano wyniki obliczeń dla różnych zmian parametrów wejściowych wymienionych powyżej.

Wszystkie grafiki wykonany przy pomocy biblioteki *matplotlib* w *Python*.

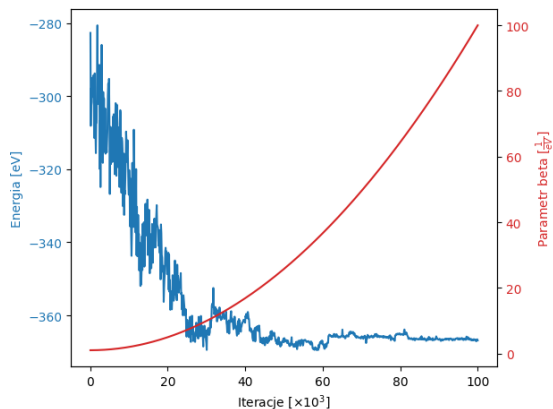
3 Wyniki

3.1 Model podstawowy

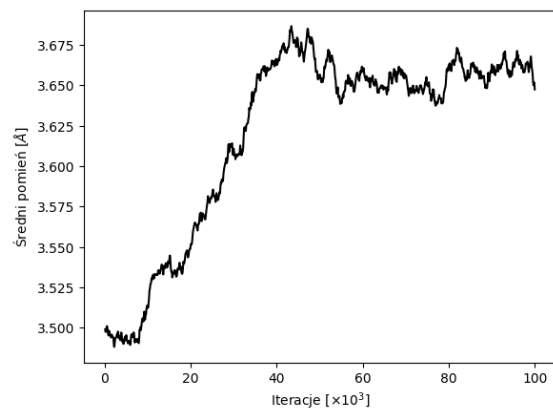
W modelu podstawowym wykonano obliczenia dla fullerenu, którego strukturę optymalizowano przez 10^5 iteracji. W efekcie atomy węgla ułożyły się na powierzchni sfery o promieniu ok. 3.65 \AA , co zaprezentowano na Rysunku 1. Sposób ułożenia atomów względem siebie znacząco odbiega od przewidywań teoretycznych, tj. pięciokątów otoczonych sześciokątami. Jak widać na wykresie z Rysunku 3 po $40 \cdot 10^3$ iteracji wartość średniego promienia oscylowała wokół 3.65 \AA , jednak z dość dużymi fluktuacjami. Energia układu (Rys. 2) gwałtownie malała przez około połowę czasu trwania optymalizacji, aż osiągnęła wartość w okolicy -366.86 eV . Analizując Rysunek 4 można dojść do wniosku, że przez cały czas trwania symulacji atomy nie utworzyły żadnej regularnej struktury. Widoczny jest jedynie pierwszy pik reprezentujący długość wiązania węgiel-węgiel.



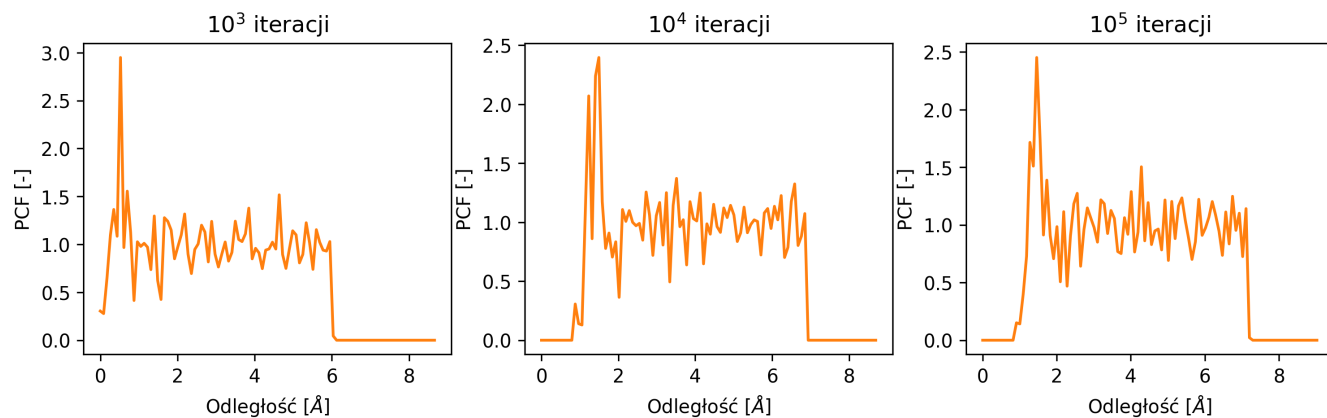
Rysunek 1: Ułożenie 60 atomów węgla po wykonaniu symulacji podstawowej.



Rysunek 2: Linia niebieską przedstawiono wartość energii całkowitej układu dla symulacji podstawowej w kolejnych iteracjach. Czerwona linia reprezentuje zmianę wartości parametru β .

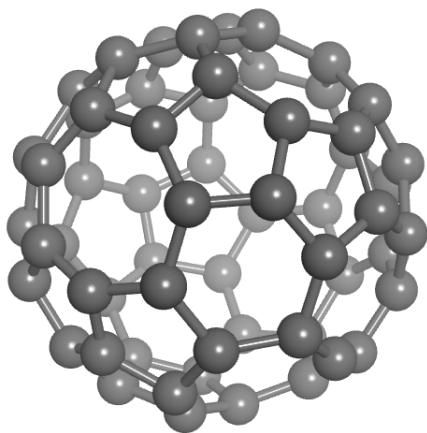


Rysunek 3: Wartość średniej odległości atomów od początku układu współrzędnych dla kolejnych iteracji trwania symulacji podstawowej.



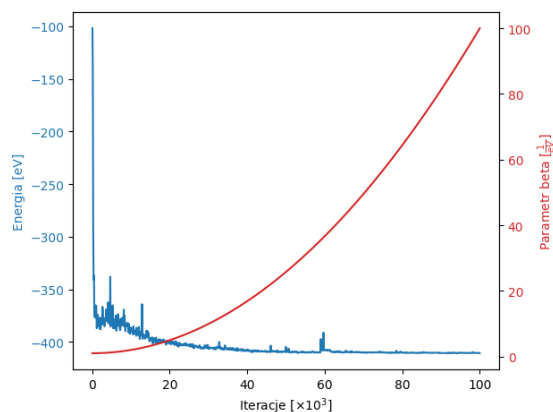
Rysunek 4: Trzy wykresy PCF dla kolejno 10^3 , 10^4 i 10^5 iteracji modelu podstawowego.

3.2 Model rzeczywisty

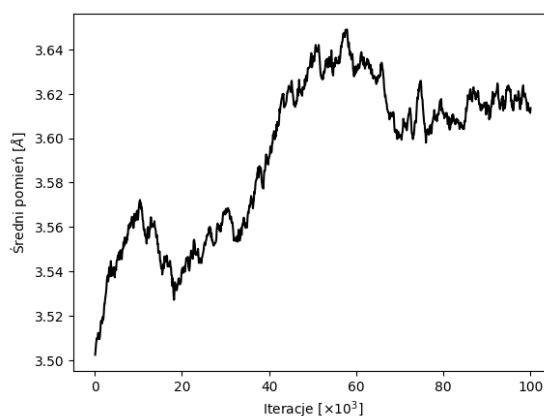


Rysunek 5: Ułożenie 60 atomów węgla po wykonaniu symulacji rzeczywistej.

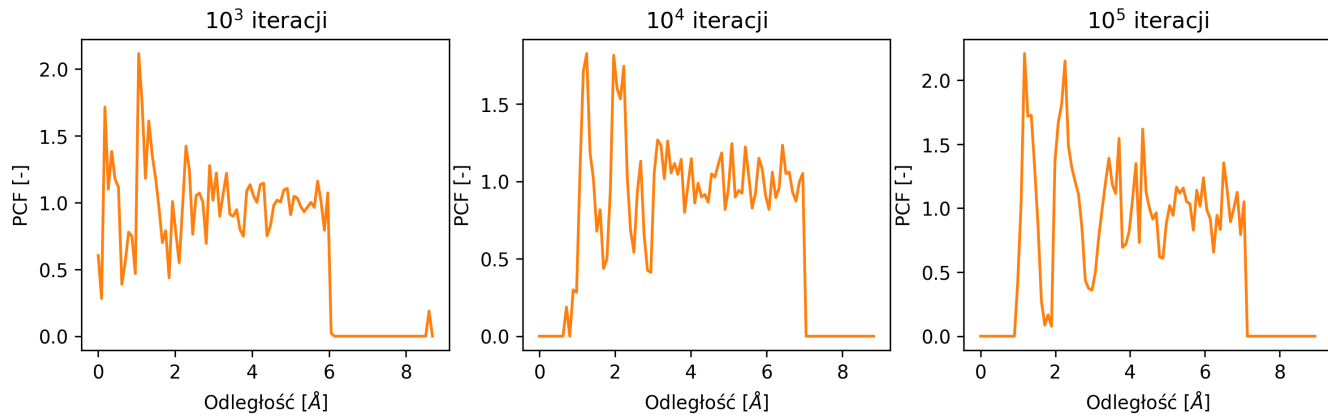
W modelu rzeczywistym węgiel został ograniczony do tworzenia maksymalnie czterech wiązań. Na Rysunku 5 widać, że przestrzenne ułożenie atomów znacznie bardziej przypomina kształtem fullerenu C₆₀. Średni promień wyniósł ok. 3.61 Å (Rys. 7). Energia układu radykalnie spadła w kilku pierwszych iteracjach, a następnie się wolno obniżała, aż do końca symulacji (Rys. 6), uzyskując ostatecznie wartość -410.80 eV. Wykresy PCF (Rys. 8) od początku posiadają kilka wyraźnych pików, które z czasem trwania symulacji unaocniają się coraz bardziej. Na tej podstawie można stwierdzić, że atomy w modelu rzeczywistym dążą do utworzenia regularnej struktury. Proces ten jest znacznie bardziej widoczny dla modelu rzeczywistego, niż modelu podstawowego, co oznacza, że działa on lepiej.



Rysunek 6: Linia niebieską przedstawiono wartość energii całkowitej układu dla symulacji rzeczywistej w kolejnych iteracjach. Czerwona linia reprezentuje zmianę wartości parametru β .



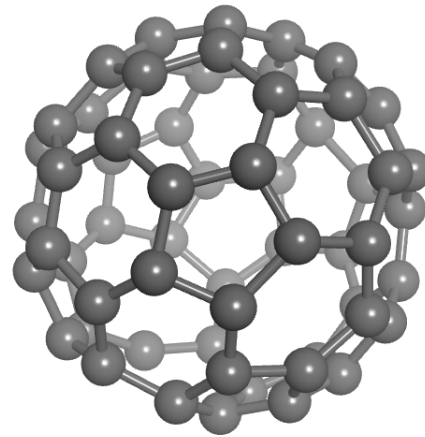
Rysunek 7: Wartość średniej odległości atomów od początku układu współrzędnych dla kolejnych iteracji trwania symulacji rzeczywistej.



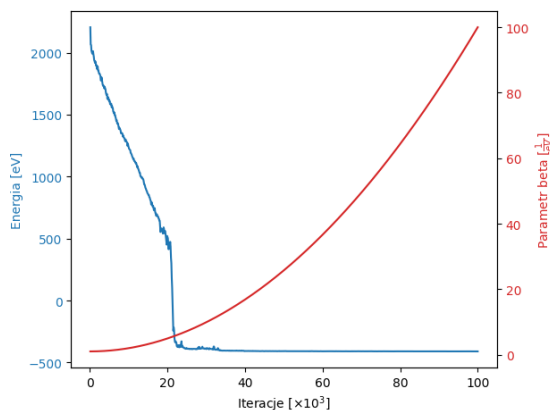
Rysunek 8: Trzy wykresy PCF dla kolejno 10^3 , 10^4 i 10^5 iteracji modelu rzeczywistego.

3.3 Model optymalny

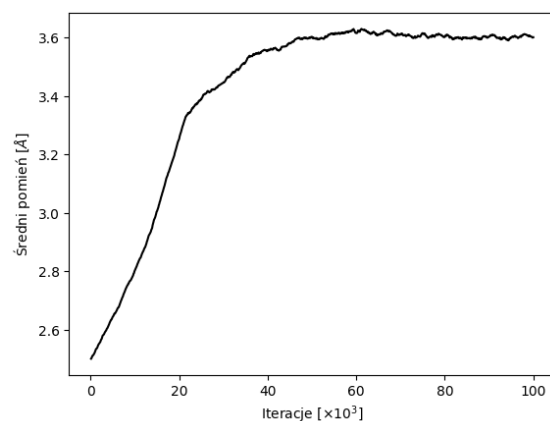
Model optymalny w gruncie rzeczy jest modelem rzeczywistym, jednak z innym promieniem startowym dla losowania początkowego położenia atomów. Wartość r_{start} została zmieniona z 3.5 Å na 2.5 Å, co spowodowało wolniejszy spadek energii (Rys. 10). Na końcu symulacji energia układu była nieznacznie większa niż dla poprzedniego modelu i wyniosła -409.79 eV. Wykres zmiany promienia (Rys. 11) charakteryzuje się bardzo małymi fluktuacjami, co może świadczyć o dobrym wpływie zmiany promienia startowego na poszukiwanie minimum energetycznego. Ostatecznie promień struktury atomowej wyniósł 3.60 Å. Analiza PCF (Rys. 12) pokazała, że w początkowej fazie symulacji nie wyłaniała się żadna regularność struktury, jednak w dalszych iteracjach atomy ułożyły się w strukturę bardzo przypominającą fulleren C60 (Rys. 9). Wykres PCF dla 10^5 iteracji charakteryzuje się wyraźnymi pikami, powstającymi w całej jego długości.



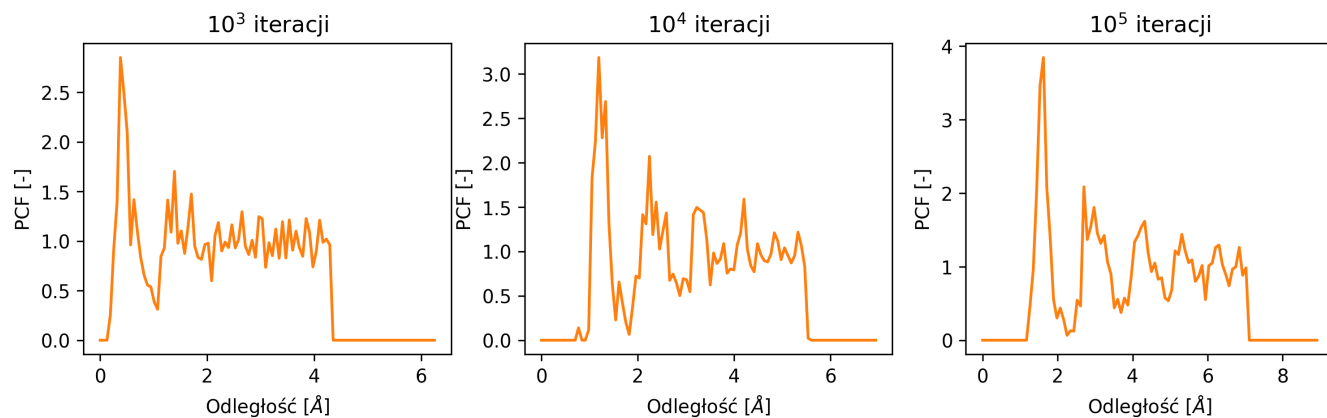
Rysunek 9: Ułożenie 60 atomów węgla po wykonaniu symulacji optymalnej.



Rysunek 10: Linia niebieską przedstawiono wartość energii całkowitej układu dla symulacji optymalnej w kolejnych iteracjach. Czerwona linia reprezentuje zmianę wartości parametru β .



Rysunek 11: Wartość średniej odległości atomów od początku układu współrzędnych dla kolejnych iteracji trwania symulacji optymalnej.

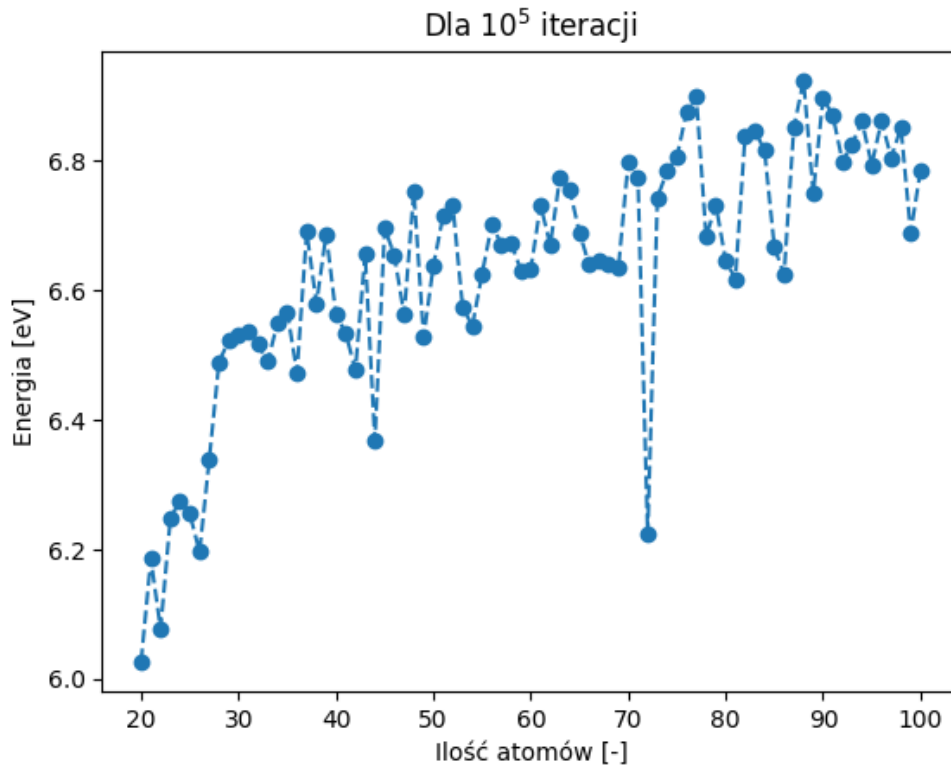


Rysunek 12: Trzy wykresy PCF dla kolejno 10^3 , 10^4 i 10^5 iteracji modelu optymalnego.

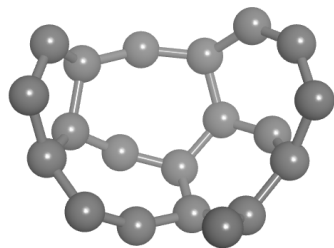
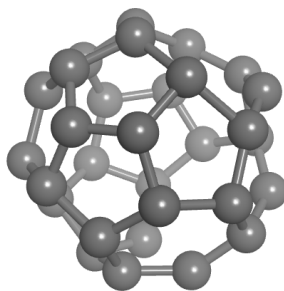
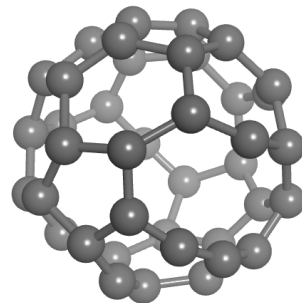
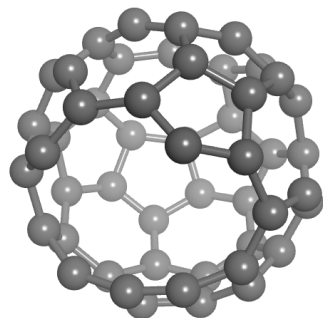
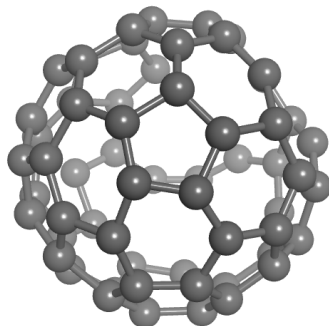
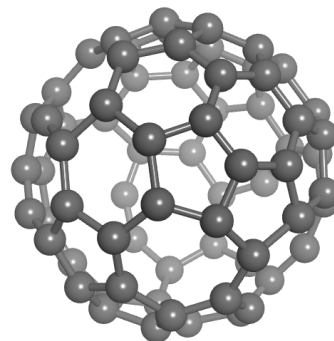
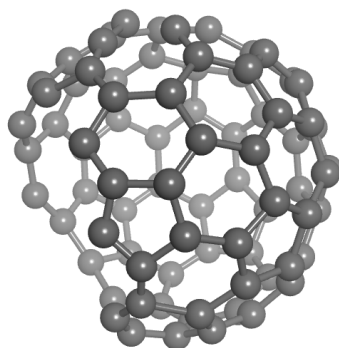
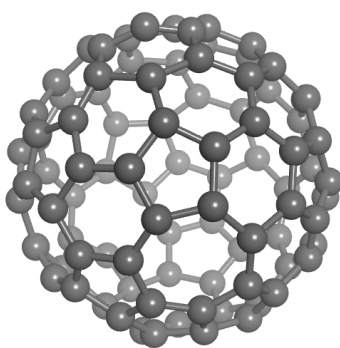
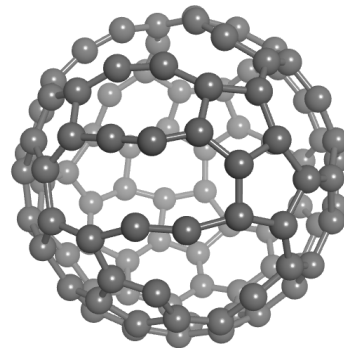
3.4 Energia wiązania struktury n-atomowej

Wykonano 80 symulacji, w których optymalizowano n-atomowe struktury węglowe przez 10^5 iteracji. Na końcu każdej iteracji otrzymaną energię przeliczono na energię wiązania zgodnie ze wzorem [31] i utworzono wykres widoczny na Rysunku 13. Jak widać energia wiązania rośnie wraz ze wzrostem ilości atomów tworzących układ.

Na kolejnej stronie przedstawiono 9 przykładowych rysunków prezentujących konformację atomów dla n równego wielokrotności 10. Co ciekawe, często najbardziej optymalna struktura nie tworzyła zamkniętych sfer, ale posiadała duże dziury.



Rysunek 13: Energia wiązania C-C dla struktur fullerenowych w zależności od ilości atomów.

**Rysunek 14:** $n = 20$ **Rysunek 17:** $n = 30$ **Rysunek 20:** $n = 40$ **Rysunek 15:** $n = 50$ **Rysunek 18:** $n = 60$ **Rysunek 21:** $n = 70$ **Rysunek 16:** $n = 80$ **Rysunek 19:** $n = 90$ **Rysunek 22:** $n = 100$

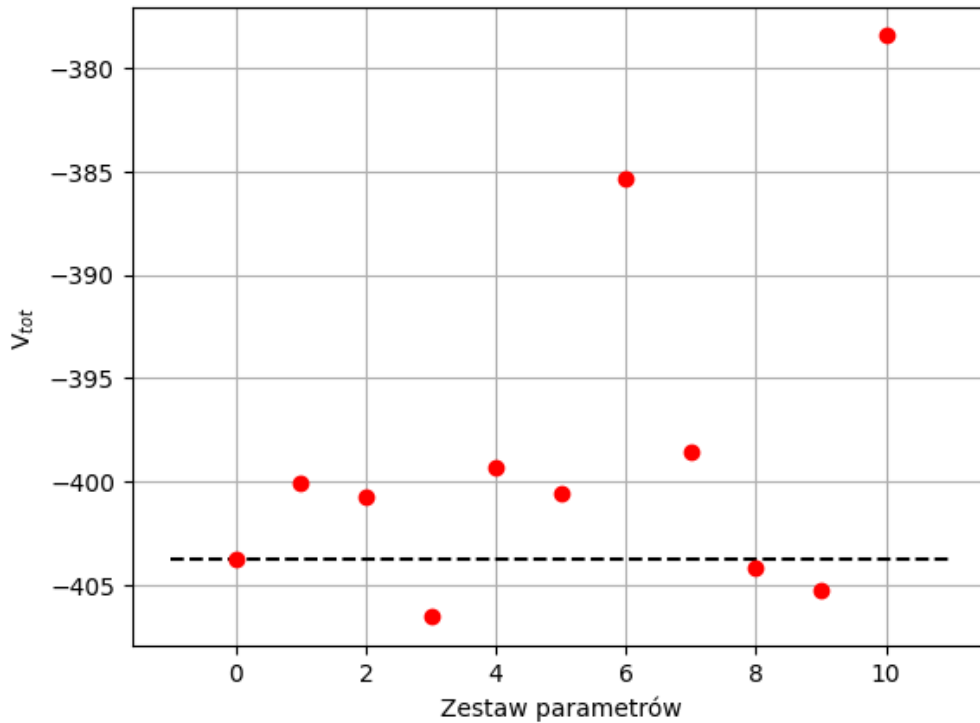
3.5 Różne parametry modelu optymalnego

W ostatniej części ćwiczenia skupiono się na zmianie wartości parametrów w_r , w_ϕ , w_θ , β_{min} , β_{max} oraz p . Wykonano 10 różnych symulacji ze zmienionymi parametrami, które powtórzono 5 razy w celu uśrednienia wyników. Wszystkie wartości parametrów oraz wyniki zaprezentowano w Tabeli 1.

Prócz 10 symulacji ze zmienionymi parametrami wykonywano również za każdym razem symulację o numerze 0, która była niezmiennym modelem optymalnym. Wyniki z tej symulacji zastosowano jako referencję do analizy pozostałych.

Z wartości średnich energii całkowitych utworzono Rysunek 23. Jak widać, jedynie trzy zaproponowane modele wypadły lepiej od symulacji niezmiennionej. Na podstawie wyników dla zestawów parametrów 6 i 10 można zauważyć, że duże zmiany w_r , w_ϕ i w_θ , niezależnie w którą stronę, negatywnie wpływają na zachowanie się symulacji. Wynik z zestawu 3 pozwala przypuszczać, że niewielkie obniżenie wartości w_ϕ i w_θ oraz podbicie w_r mogłoby stanowić dobrą drogę do znalezienia bardziej optymalnych parametrów symulacji.

Zestawy 2, 4 i 7 oraz 8 i 9 pokazują, że korzystnym dla działania symulacji jest zwiększenie zakresu między minimum, a maksimum współczynnika β . Ponadto symulację dla zestawów 1 i 5 pokazują, że radykalne zwiększenie wartości wykładnika p nie wpływają korzystnie na wyniki symulacji.



Rysunek 23: Zależność średniej energii całkowitej układu 60 atomów od dobranych parametrów. Wartości na osi x reprezentują numer symulacji o zestawie parametrów podanym w Tabeli 1.

Tabela 1: Wartości parametrów startowych symulacji optymalnej wraz z wynikami energii całkowitej oraz energii wiązania dla pięciu powtórzeń. Ostatnie kolumny pokazują wartości uśrednione. Symulacja z indeksem zero jest niezmienną wersją modelu optymalnego.

	w_r	w_ϕ	w_θ	β_{min}	β_{max}	p	1		2		3		4		5		V_{tot}	V_{bond}
							V_{tot}	V_{bond}	V_{tot}	V_{bond}	V_{tot}	V_{bond}	V_{tot}	V_{bond}	V_{tot}	V_{bond}	Srednia	V_{bond}
0	10^{-4}	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$	1	100	2	-401,70	-6,69	-404,90	-6,75	-405,31	-6,76	-402,38	-6,71	-404,62	-6,74	-403,78	-6,73
1	10^{-4}	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$	1	100	5	-399,74	-6,66	-399,26	-6,65	-398,44	-6,64	-400,54	-6,68	-402,54	-6,71	-400,10	-6,67
2	10^{-4}	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$	20	80	2.5	-399,89	-6,66	-403,55	-6,73	-402,79	-6,71	-397,71	-6,63	-399,98	-6,67	-400,78	-6,68
3	$5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	1	100	2	-401,82	-6,70	-402,58	-6,71	-408,44	-6,81	-407,99	-6,80	-412,02	-6,87	-406,57	-6,78
4	$5 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-2}$	30	100	1	-404,70	-6,74	-398,75	-6,65	-393,20	-6,55	-397,87	-6,63	-402,05	-6,70	-399,31	-6,66
5	10^{-4}	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$	1	10	5	-403,38	-6,72	-401,85	-6,70	-404,19	-6,74	-394,79	-6,58	-398,83	-6,65	-400,61	-6,68
6	$5 \cdot 10^{-4}$	$25 \cdot 10^{-2}$	$25 \cdot 10^{-2}$	1	100	2	-395,92	-6,60	-388,11	-6,47	-386,23	-6,44	-370,55	-6,18	-385,75	-6,43	-385,31	-6,42
7	$2 \cdot 10^{-4}$	$10 \cdot 10^{-2}$	$10 \cdot 10^{-2}$	25	75	1.3	-395,37	-6,59	-395,81	-6,60	-399,96	-6,67	-399,38	-6,66	-402,20	-6,70	-398,54	-6,64
8	$1.8 \cdot 10^{-4}$	$5.4 \cdot 10^{-2}$	$5.4 \cdot 10^{-2}$	1	125	2.2	-402,82	-6,71	-409,61	-6,83	-406,95	-6,78	-397,37	-6,62	-404,19	-6,74	-404,19	-6,74
9	$1.8 \cdot 10^{-4}$	$5.4 \cdot 10^{-2}$	$5.4 \cdot 10^{-2}$	1	200	2.5	-406,69	-6,78	-398,48	-6,64	-401,36	-6,69	-411,36	-6,86	-408,50	-6,81	-405,28	-6,75
10	$0.5 \cdot 10^{-4}$	$0.25 \cdot 10^{-2}$	$0.25 \cdot 10^{-2}$	1	100	2	-369,93	-6,17	-379,37	-6,32	-375,67	-6,26	-381,04	-6,35	-386,15	-6,44	-378,43	-6,31

4 Wnioski

W powyższym sprawozdaniu pokazano, że metody MC jak najbardziej nadają się do szukania minimum energetycznego struktur atomowych w modelowaniu molekularnym. Zaprezentowane trzy modele: podstawowy, rzeczywisty i optymalny pokazują jak niewielkie modyfikacje algorytmu potrafią mieć kolosalny wpływ na poprawę wyników. Wykresy PCF dla modelu optymalnego (Rys. 12) pokazują, że ostatni model uzyskał cel jakim było dalekosięgowe uporządkowanie struktury fullereny.

W kolejnej części sprawozdania pokazano, że wraz ze wzrostem ilości atomów w strukturze, energia wiązania między nimi rośnie. Choć na Rysunku 13 widoczne są duże fluktuacje, co sugeruje, że należałoby uśrednić wyniki po kilku próbach, to widać, że mamy do czynienia z tendencją wzrostową.

W ostatnim fragmencie sprawozdania skupiono się na analizie wpływu parametrów wejściowych w_r , w_ϕ , w_θ , β_{min} , β_{max} oraz p na wyniki symulacji. Jak pokazano, radykalne zmiany któregośkolwiek z parametru negatywnie wpływają na symulację, co jest zgodne z intuicją. Były one testowane i dobierane przez specjalistów w tej dziedzinie, więc najprawdopodobniej ich wartości są bliskie wartościom idealnym. Udało się poprawić nieznacznie wyniki symulacji w kilku podejściach poprzez niewielkie obniżenie wartości w_ϕ i w_θ oraz poszerzenie zakresu zmian współczynnika β .

Literatura

- [1] Tomasz Chwiej, dr hab. inż., skrypt do zadania “*Monte Carlo: modelowanie struktury fullerenów metodą symulowanego wyżarzania*”, AGH, Kraków, 25 kwietnia 2024.

- [2] Brenner, D. W. (1990). *Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films*. Physical Review B, 42(15), 9458–9471. doi:10.1103/physrevb.42.9458