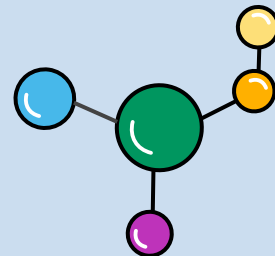
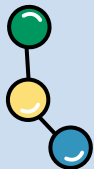


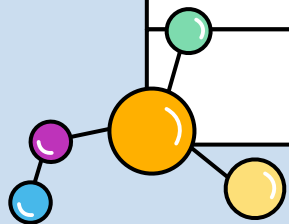
Метод классической молекулярной динамики

Коломникова Дарья, 20213



01

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ



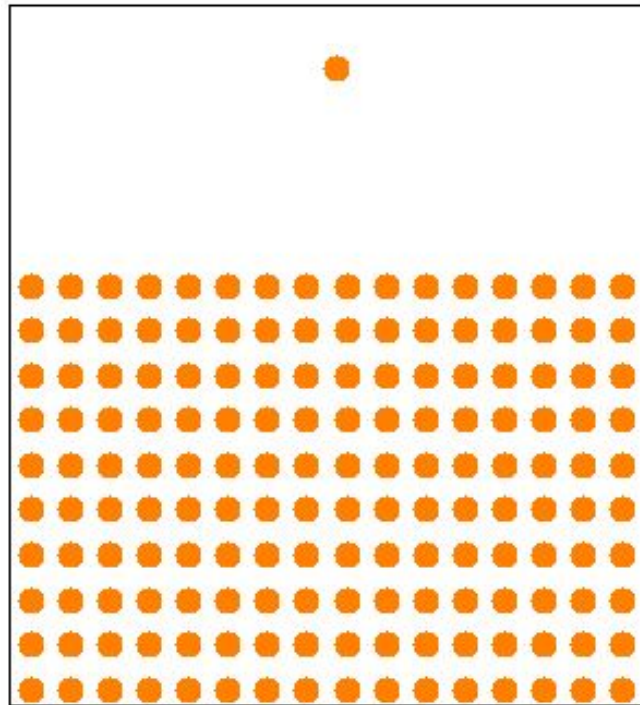
ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ

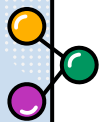
Метод молекулярной динамики - метод, в котором временная эволюция системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения.

- Изначально был разработан в теоретической физике - первое упоминание в 1958 году.
- Получил широкое распространение в химии
- С 1970-х используется в биохимии и биофизике.

Популярные задачи: моделирование химических реакций, определение структуры белка.

time 0.0041 ps





ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ

01

Для описания движения применяется **классическая механика**. Закон движения частиц находится при помощи **аналитической механики**.

02

Силы межатомного взаимодействия можно представить в форме **классических потенциальных сил**.

03

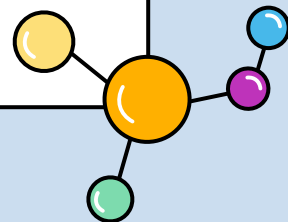
Точное знание траекторий частиц на больших промежутках времени не является необходимым.

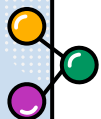
04

Наборы полученных конфигураций распределены в соответствии с некоторой **статистической функцией распределения**

МАТЕМАТИКА

02





ТЕОРИЯ

Начальные условия для системы из N частиц:

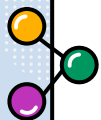
1. Скорости частиц
2. Начальные координаты
3. Массы
4. **Законы взаимодействия**

$$m_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial t^2} = F_i; \quad F_i = -\frac{\partial U}{\partial r_i}.$$

В методе молекулярной динамики система рассматривается с позиции классической *ньютоновской механики*.

Шаг моделирования: решение уравнений Ньютона для набора атомов.

Как правило, решается *алгоритмом Верле*.



АЛГОРИТМ ВЕРЛЕ

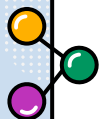
1. Записывается разложение в ряд Тейлора вектора местоположения в два момента времени:

$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2} + \frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6} + O(\Delta t^4),$$

$$\vec{x}(t - \Delta t) = \vec{x}(t) - \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2} - \frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6} + O(\Delta t^4),$$

2. Складываем уравнения и выражаем новые координаты:

$$\vec{x}(t + \Delta t) = 2\vec{x}(t) - \vec{x}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4).$$



ПОТЕНЦИАЛ

$$m_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial t^2} = F_i; \quad F_i = -\frac{\partial U}{\partial r_i}.$$

Приближение: все взаимодействия в системе представляют суммой взаимодействий между каждой парой частиц - *парное приближение*.

Парный потенциал - функциональная зависимость потенциальной энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними.

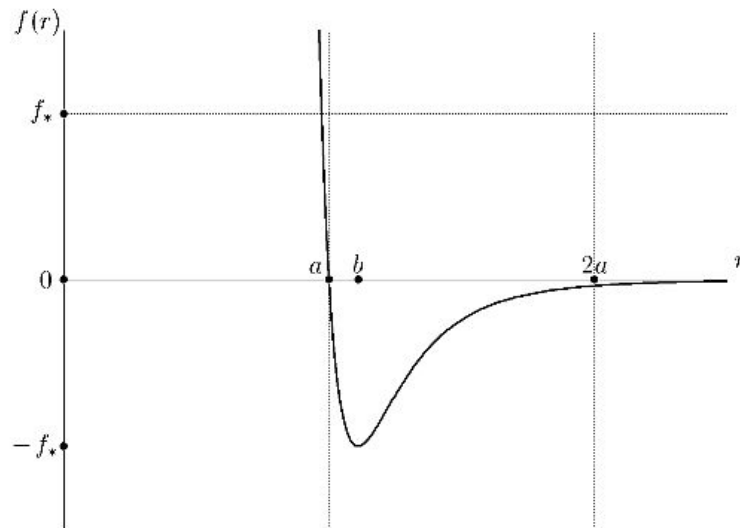
1. Парный потенциал Леннард-Джонса ("6-12")

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

2. Букиннгема

$$U(r) = A \exp(-Br) - \frac{C}{r^6}$$

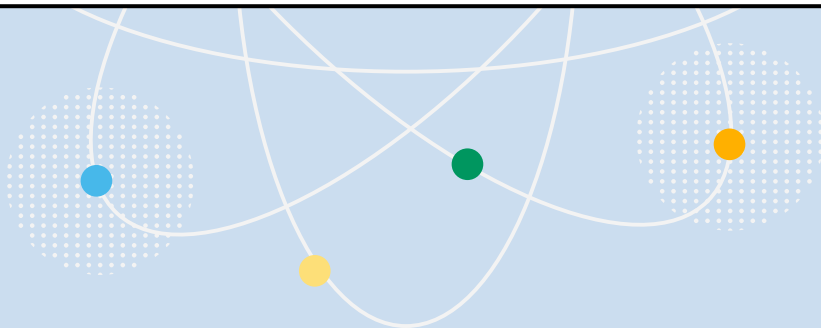
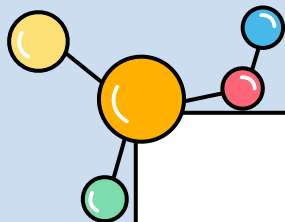
3. Борн-Майера-Хаггинса и др.



Парный потенциал Леннар-Джонса (a - межатомное расстояние, f - сила взаимодействия, r - расстояние)

03

ОГРАНИЧЕНИЯ ПРИМЕНИМОСТИ



ВОЛНА ДЕ БРОЙЛЯ

Метод применим, если длина волны Де Бройля атома (или частицы) много меньше, чем межатомное расстояние.

Волна де Бройля - волна амплитуды вероятности, определяющая плотность вероятности обнаружения объекта в заданном интервале пространства.

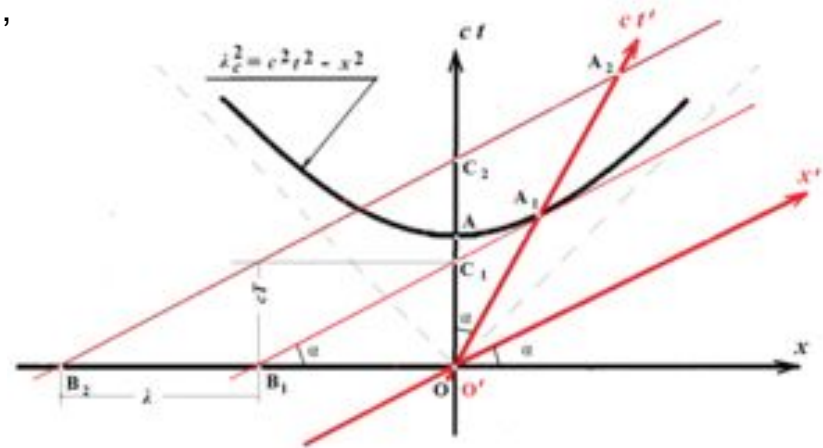


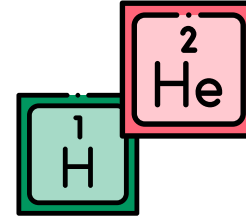
Иллюстрация волны де Бройля согласно википедии.

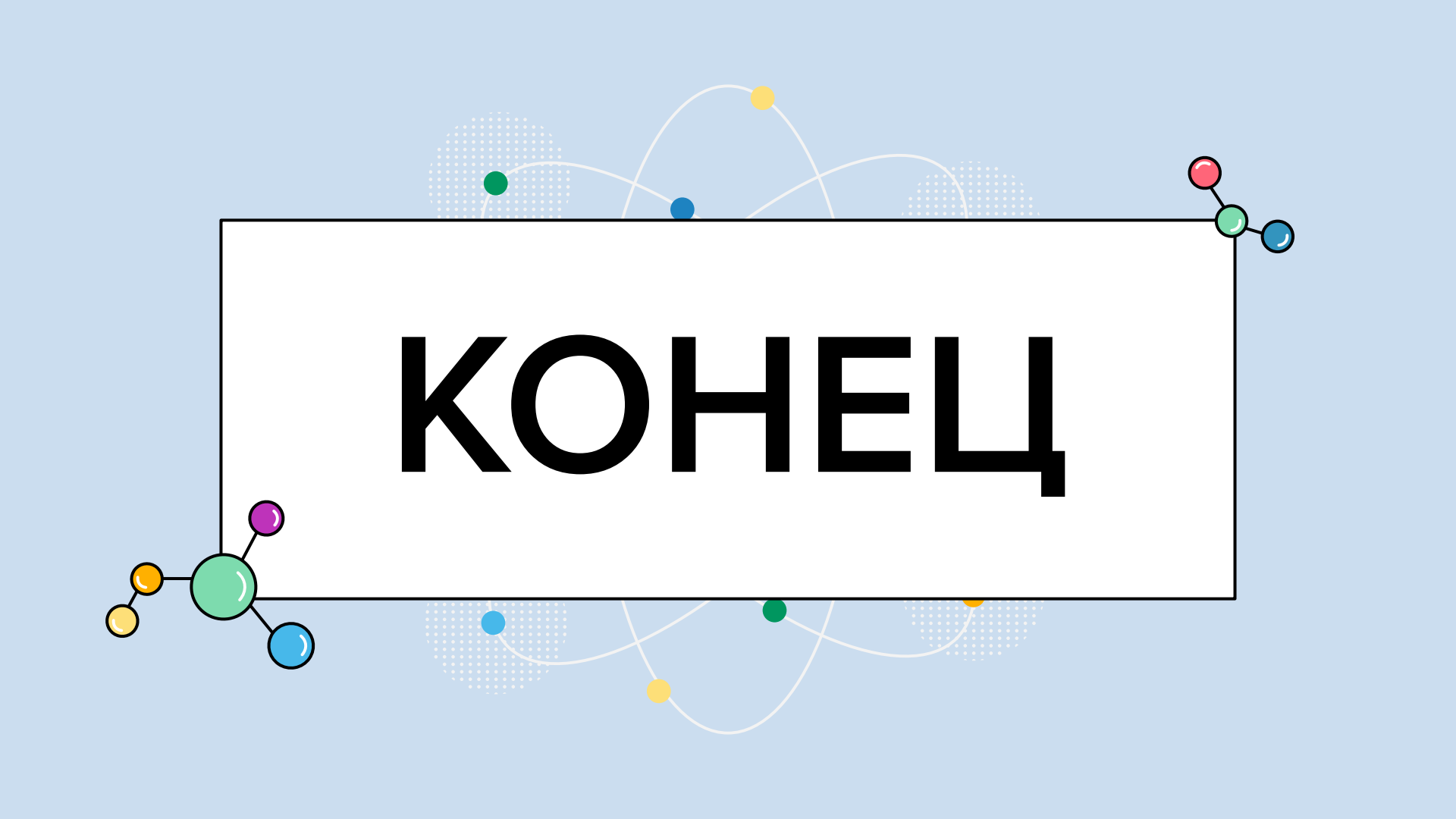
Понятнее не стало



ДРУГИЕ ОГРАНИЧЕНИЯ

1. Не применим для легких атомов
2. При низких температурах требует использования квантовохимических методов
3. Времена, на которых рассматривается поведение системы, должны быть больше, чем время релаксации исследуемых физических величин.





КОНЕЦ