

Л.4 Метод молекулярної динаміки для (NVE) ансамблю

(NVE) ансамбль: постійні кількість частинок, об'єм, енергія

Початкова конфігурація – кристалічна ґратка

Як отримати, наприклад, рідину при T_{ref} ?

1. Необхідно розплавити початкову ґратку при високій температурі ($T_{\text{high}} \sim T_{\text{ref}} + 500\text{K}$)
2. Поволі опустити температуру системи з T_{high} до T_{ref}
3. Провести екваїбрацію при температурі T_{ref}

Перенормування температури

$$T(t) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2(t)}{k_B N_{\text{deg. freedom}}}$$

-миттєва температура системи

$$N_{\text{deg. freedom}} = 3N - 3$$

-число ступенів вільності в
однокомпонентній однорідній системі

$$T_{\text{new}}(t) = \beta T(t) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i (\sqrt{\beta} v_i)^2(t)}{k_B N_{\text{deg. freedom}}}$$

-бажану температуру
можна отримати
перенормувавши
швидкості частинок

Кожних 20-30 кроків миттєву температуру треба перенормувувати на бажаний рівень, аж поки система не прийде в рівновагу і буде підтримувати задану температуру. При перенормуванні температури енергія не зберігається – ми штучно або додаємо або забираємо частину енергії.

Обчислення сил, що діють на частинки

$$\vec{F}_i(t) = -\vec{\nabla} E_{pot}(\vec{r}_i)$$

$$E_{pot}(\vec{r}_i) = \sum_{j \neq i} U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

- потенціальна енергія і-ї частинки
для випадку парних потенціалів
взаємодії

$$F_{x,i}(t) = -\sum_{j \neq i} \left(\frac{\partial U}{\partial r_{ij}} \right) \frac{(x_i - x_j)}{r_{ij}}$$

- x-компонента сили,
що діє на частинку

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$$

- відстань між
частинками

Обчислення сил, що діють на частинки

$$F_{x,i}(t) = - \sum_{j \neq i} \left(\frac{\partial U}{\partial r_{ij}} \right) \frac{(x_i - x_j)}{r_{ij}}$$

- в сумі по j -тих частинках враховуються внески лише для частинок в межах радіусу взаємодії

$$U_{LJ}(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{12}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{12}} \right)^6 \right] & r_{ij} \leq r_{cut} \\ 0 & r_{ij} > r_{cut} \end{cases}$$

$r_{cut} \approx 2.5\sigma$ - загальноприйнятий радіус обрізання для LJ потенціалів

Що твориться з частинками на відстані $r_{ij} = r_{cut}$?

Чисельні алгоритми розв'язування рівнянь Ньютона

1. Алгоритм Верле

Розглянемо розклади у ряд Тейлора для координат

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{F(t)}{2m} \Delta t^2 + O(\Delta t^3)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{F(t)}{2m} \Delta t^2 - O(\Delta t^3)$$

Їх сума:

$$r(t + \Delta t) + r(t - \Delta t) = 2r(t) + \frac{F(t)}{m} \Delta t^2 + O(\Delta t^4)$$

Алгоритм Верле

$$r(t + \Delta t) \approx 2r(t) - r(t - \Delta t) + \frac{F(t)}{m} \Delta t^2$$

Δt - часовий крок у МД

Різницева схема обчислення швидкості частинок, як першої похідної по часу

$$v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t^2)$$

Цей алгоритм дозволяє визначити швидкості лише коли нові координати уже отримані, а тому він добре працює коли немає потреби перенормувувати швидкості для контролю температури.

Розрахунок величин за допомогою функцій розподілу

$$n_{ij}(r) = \frac{4\pi N_i}{V} \int_0^r g_{ij}(r') r'^2 dr'$$

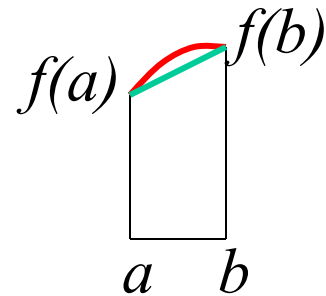
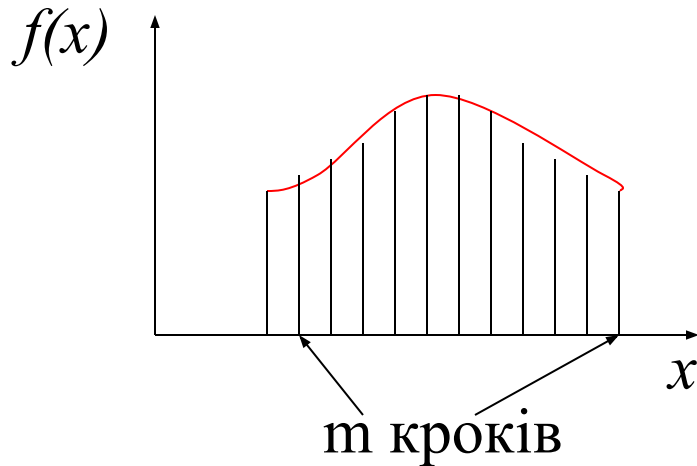
Біжуче (залежне від відстані)
число сусідів і-го сорту
навколо частинок j-го сорту

$$S(k) = 1 + \frac{4\pi N}{V} \int_0^\infty (g(r) - 1) \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 dr$$

Структурний
фактор

Методи чисельного інтегрування

Формула трапецій.



Площа однієї
трапеції:

$$S_{tr} = \frac{(b-a)}{2} [f(a) + f(b)]$$

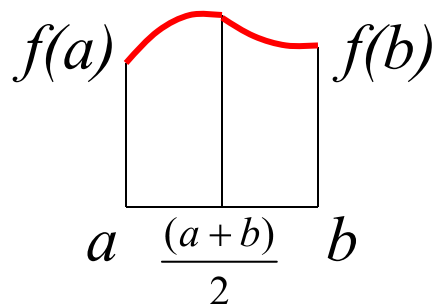
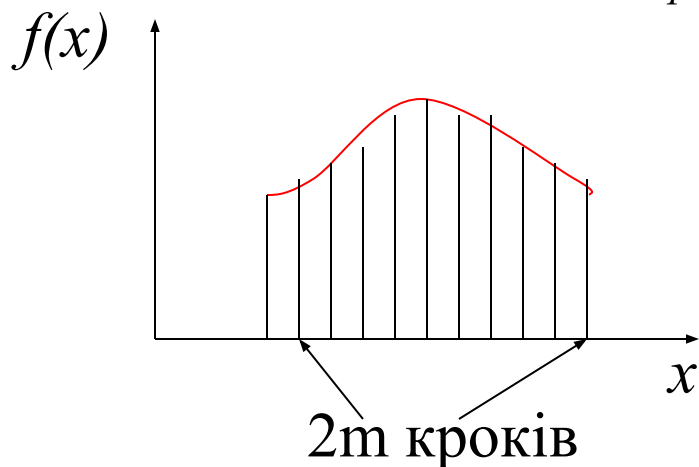
Формула трапецій для інтегрування функцій з постійним кроком:

$$\int_A^B f(x) dx = \frac{(B-A)}{2m} [f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{m-1} + f_m]$$

Методи чисельного інтегрування

Формула Сімпсона.

$$S_{\text{Simpson}} = \frac{(b-a)}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$



Формула Сімпсона для інтегрування функцій з постійним кроком:

$$\int_A^B f(x) dx = \frac{(B-A)}{6m} [f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 \dots + 4f_{2m-1} + f_{2m}]$$