

Лекция №8. Көпбөлшекті жүйенің микроскопиялық қасиеттерін молекулалық динамика әдісімен моделдеу

Молекулалық динамика (МД) әдіс көпбөлшекті жүйелердің тепе-тең және тепе-тең емес қасиеттерін моделдеудің ең әмбебап тәсілі болып табылады. МД әдісінің ерекшелігі сол, мұндағы фазалық кеңістікте жүйенің траектория бойынша қозғалысы детерминантты түрде болады, яғни көп бөлшектен тұратын жүйе үшін қозғалыс теңдеулерін шешу керек. Монте-Карло әдісіне қарағандағы бұл әдістің артықшылығы тасымалдау құбылысын зерттеуге болады, алайда зерттелініп жатқан процесстің релаксация уақыты есептеу уақытынан көп кіші болу керек деген шарт орындалуы қажет. Айта кетер жай, есептеулер кезінде микроскопиялық (гидродинамикалық емес) процесстермен шектелуге тура келеді, себебі қазіргі заман компьютерлерінің есептеу уақыты жүйенің дамуын $10^{-9} - 10^{-10}$ с ішінде бақылауға мүмкіндік береді.

МД әдісін алғаш қатты сферадан тұратын жүйенің қозғалысын зерттеу үшін Олдер мен Вайнрайт [3] ұсынған. Біраз уақыт әдіс қарқынды дамыды және соңғы уақыттарда тығыз жүйенің термодинамикалық және тасымалдау құбылыстарын зерттеу үшін кеңінен қолданылуда. Сонымен қатар, ол Монте-Карло әдісін термодинамикалық қасиеттерді зерттеу жағынан толықтырады және тығыз ортаның динамикасын зерттейтін бірден-бір әдіс болып табылады. МД әдісінде ұяшықты таңдау, бөлшектерді орналастыру мен периодты шекаралық шарттарды қою Монте-Карло әдісіндегідей болады.

МД әдісі Монте-Карло әдісіне қарағанда қарапайым принципке негізделген және көпбөлшекті жүйе үшін Ньютонның қозғалыс теңдеуін шешуден тұрады.

N бөлшектің бастапқы координаттары мен жылдамдықтары кездейсоқ шамалар болып алынады, бірақ жүйенің толық импульсі нольге тең болуы шарт:

$$\sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i = 0, \quad (1)$$

жүйенің гамильтонианы мен температурасы сәйкесінше:

$$H = \sum_i \vec{p}_i^2 / 2m_i + \sum_i \Phi(r_{ij}) \quad (2)$$

$$\langle T \rangle = \frac{1}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i \quad (3)$$

болады.

(2) теңдеудегі бірінші қосынды жүйенің кинетикалық энергиясы болып табылады, ал екіншісі – потенциалдық энергия; m_i - i -ші бөлшектің массасы. Ендігі мақсатымыз, N бөлшек үшін $6N$ Ньютоның қозғалыс теңдеулерін шешу:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \quad (4)$$

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{1}{m_i} \vec{F}_i$$

мұдағы, \vec{F}_i - i бөлшегіне негізгі ұяшықтағы $N-1$ бөлшектер тарапынан әсер ететін күш:

$$\vec{F}_i = -\sum_{j \neq i} \text{grad} \Phi_{ij}. \quad (5)$$

i бөлшегін қоршап тұрған j бөлшектері негізгі ұяшықта немесе репликаларда орналасқан.

Айталық, t уақыт мезетінде жүйе бөлшектерінің ($i = \overline{1, N}$) $\vec{r}_i(t)$ координаттары мен $\vec{v}_i(t)$ жылдамдықтары белгілі болсын. Уақыттың келесі $\vec{r}_i(t + \Delta t)$ мезеті және жылдамдықтың $\vec{v}_i(t + \Delta t)$ өзгерісі үшін айнымалыларды анықтауға мүмкіндік беретін сандық схеманы жасау керек, яғни (4) қозғалыс теңдеулерін интегралдау алгоритмін жасау.