

# **Модуль 5. Метод молекулярной динамики для моделирования в веществе процессов, обусловленных радиационным воздействием (часть 1)**

1. Основные принципы метода молекулярной динамики.
2. Основные расчетные процедуры при реализации метода молекулярной динамики.

## 5.1. Основные принципы метода молекулярной динамики

### ● Суть метода молекулярной динамики

- 1). Задаются исходные координаты частиц в соответствии с кристаллической структурой вещества, его плотностью и температурой.
- 2) Рассчитывается движение некоторого числа характерных частиц рассматриваемого вещества под действием приложенных сил.
- 3). По характеристикам смещений атомов, произошедших вследствие приложенных сил или каких-либо возмущений в веществе, определяются макроскопические характеристики состояния этого вещества.

## 5.2. Основные расчетные процедуры

1. Построение кристаллита.
2. Задание сил межатомного взаимодействия.
3. Задание граничных условий.
4. Решение уравнений движения.
5. Задание начальных условий для решения уравнений движения.
6. Задание внешних сил или возмущений.

## 5.2.1. Построение кристаллита

- Координаты задаются исходя из структуры изучаемого вещества, в соответствии с типом кристаллической решетки.
- Выбор размера и формы кристаллита зависит от нескольких противоречивых факторов:
  - с одной стороны, требуется большой объем, чтобы удержать сильное возмущение, причиной которого является смещенный атом;
  - с другой стороны, с увеличением числа атомов возрастает время вычислений.

## 5.2.2. Задание сил межатомного (межчастичного) взаимодействия

- Так как не существует потенциалов межатомного взаимодействия, которые удовлетворительно описывали бы взаимодействие в достаточно широком диапазоне расстояний между атомами, то используется комбинация потенциальных функций, т.е. расчеты разделяются по различным потенциальным функциям в зависимости от расстояния между частицами.

## 5.2.2. Задание сил межатомного (межчастичного) взаимодействия

**Пример 1.** Подход, предложенный Робинсоном и Оэном.

Они предложили использовать для различных межатомных расстояний два разных потенциала: Бора и Борна-Майера, сшивая их.

## 5.2.2. Задание сил межатомного (межчастичного) взаимодействия

**Пример 2.** Эргинсой, Энглерт, Винийард предложили потенциал, сшитый из четырех простых потенциалов.

– Для  $r < 0,7l_0$  использовался экранированный кулоновский потенциал:

$$\varphi(r) = (0,7 / r) \cdot 8573 \cdot \exp(-6,547r) \quad (1)$$

Здесь  $r$  – расстояние между взаимодействующими атомами,  $l_0$  – половина длины элементарной ячейки рассматриваемого металла (для  $\alpha$ -железа  $l_0 = 1,43 \cdot 10^{-10}$  м).

## 5.2.2. Задание сил межатомного (межчастичного) взаимодействия

- В интервале  $0,7 \cdot l_0 < r < 1,35 \cdot l_0$  применяется потенциал Борна-Майера:

$$\varphi(r) = 8573 \exp(-6,547r) \quad (2)$$

- Для  $1,35 \cdot l_0 < r < 2,0 \cdot l_0$  использовался потенциал Морзе:

$$\varphi(r) = D \{ \exp(-2\alpha(r - r')) - 2 \exp(-\alpha(r - r')) \} \quad (3)$$

где  $D = 0,223$  эВ – энергия диссоциации,  $\alpha = 1,3885 \cdot 10^{10}$  м

– характеристика жесткости взаимодействия;

$r' = 2,845 \cdot 10^{-10}$  м – расстояние между ближайшими атомами в кристалле (железа).



## 5.2.2. Задание сил межатомного (межчастичного) взаимодействия

- Для  $2,0 \cdot l_0 < r < 2,5 \cdot l_0$  снова использовался потенциал Морзе, но умноженный на произвольно выбранную функцию от  $r$ , которая была равна 1 при  $r=2,0 \cdot l_0$  и гладко уменьшалась до 0,1 при  $r=2,5 \cdot l_0$ .
- При небольших расстояниях между атомами этот составной потенциал отталкивающий, при больших – слабопритягивающий.

## 5.2.2. Задание сил межатомного (межчастичного) взаимодействия

- **Решение проблемы сшивки потенциалов**

Точные значения расстояний, на которых осуществляется сшивка различных потенциалов межатомного взаимодействия, обычно ищется из условия равенства не потенциальных функций, а их первых производных (т.е. сил). В противном случае при моделировании может возникнуть ситуация, когда при незначительном изменении координат происходит значительное изменение сил, действующих между атомами, что лишено физического смысла.

## 5.2.2. Задание сил межатомного (межчастичного) взаимодействия

- Парные потенциалы взаимодействия, используемые на больших расстояниях, в целом хорошо описывают структуру кристаллической решетки в нормальном состоянии, но применение их для неравновесных систем, например в зоне каскада смещений, некорректно, так как параметры подобных потенциалов обычно вычисляют из модулей упругости идеальных кристаллов.

В этой связи расчет потенциалов на расстояниях, превышающих  $0,7l_0$ , производят на основе метода псевдопотенциалов, который позволяет исследовать реальные (в том числе аморфные) структуры, так как при его разработке не предполагалось какой либо симметрии в системе.

## 5.2.3. Задание граничных условий

- Для устранения влияния поверхности на результат моделирования используются граничные условия, которые лимитируют движение приповерхностных атомов расчетного кристаллита.

В машинном моделировании можно выделить три типа граничных условий:

- «жесткие» граничные условия;
- «гибкие» граничные условия;
- периодические граничные условия.

## 5.2.3. Задание граничных условий

### 1). “Жесткие” граничные условия.

Координаты граничных частиц зафиксированы и предполагается, что достаточно большое количество подвижных атомных слоев компенсирует влияние неподвижности внешних атомов.

В зависимости от решаемой задачи граничные частицы могут быть зафиксированы в узлах идеальной решетки, либо упруго искаженной.

## **5.2.3. Задание граничных условий**

### **2). «Гибкие» или подвижные граничные условия**

Так как предполагается, что кристаллит окружен со всех сторон упругим континуумом, необходимо учитывать реакцию этого континуума на смещение поверхностных атомов кристаллита.

Для этого к каждому поверхностному атому прикладывается упругая сила, пропорциональная смещению, и вязкая сила, пропорциональная скорости смещения. Таким образом, упругая среда, окружающая кристаллит, реагирует на перемещения атомов, происходящие в нем.

Эти граничные условия позволяют несколько сократить размер кристаллита по сравнению со случаем применения жестких условий, но существенно усложняют моделирующую программу.

## 5.2.3. Задание граничных условий

### 3). Периодические граничные условия.

Применяются, когда в некотором из направлений по характеру задачи имеется период полной идентичности.

С пограничными ячейками кристаллита соседствуют ячейки, в которых атомы движутся точно так же, как и в ячейках на противоположной поверхности кристаллита. В этом направлении размер расчетной ячейки выбирается равным периоду идентичности, что позволяет имитировать бесконечную протяженность кристалла в рассматриваемом направлении.

Эти граничные условия являются более точными, чем перечисленные выше.

## 5.2.4. Решение уравнений движения

- Движение частиц происходит в соответствии со вторым законом Ньютона:

$$\frac{d\vec{R}_i}{dt} = \vec{V}_i \quad , \quad m_a \frac{d\vec{V}_i}{dt} = \vec{F}_i \quad . \quad (4)$$

Здесь  $\vec{R}_i$  и  $\vec{V}_i$  - положение и скорость  $i$ -го атома.

$m_a$  – масса частицы.

$\vec{F}_i$  - сила, действующая на атом со стороны других атомов кристаллита.



## 5.2.4. Решение уравнений движения

$\vec{F}_i$  задается выбранным потенциалом межатомного взаимодействия:

$$F_i^j(t) = - \sum_{k, k \neq i} \frac{\partial \varphi(|\vec{R}_i(t) - \vec{R}_k(t)|)}{\partial x^j} \quad (5)$$

- $\varphi(r)$  потенциал взаимодействия,  $F_i^j(t)$  -  $j$ -тая компонента силы, действующая на  $i$ -тый атом кристаллита ( $j=1,2,3$ ,  $i=1, N$ ,  $N$  – количество атомов в кристаллите).

## 5.2.4. Решение уравнений движения

**Конечно-разностные схемы для решения уравнений движения.**

1). Схема с перешагиванием.

Координаты атомов вычисляются на целых временных слоях, а скорости – на полуцелых, тогда:

$$V_i^j(t + \Delta t / 2) = V_i^j(t - \Delta t / 2) + \frac{\Delta t}{m_a} \cdot F_i^j(r(t)) \quad (6)$$

$$R_i^j(t + \Delta t) = R_i^j(t) + \Delta t \cdot V_i^j(t + \Delta t / 2) \quad (7)$$

## 5.2.4. Решение уравнений движения

- Конечно-разностные схемы для решения уравнений движения.

2). Метод средней силы

- Задаются координаты  $R_i^j(t)$  и скорости  $V_i^j(t)$ , рассчитываются силы  $F_i^j(t)$  для каждой частицы в момент времени  $t$ ;

- делаются предварительные вычисления новых координат:

$$\left(R_i^j\right)^*(t + \Delta t) = R_i^j(t) + V_i^j(t)\Delta t + F_i^j(t)\Delta t^2 / (2m_a)$$

- определяются силы, действующие на атом в этих позициях:  $\left(F_i^j\right)^*$

## 5.2.4. Решение уравнений движения

- **Конечно-разностные схемы для решения уравнений движения.**

2). Метод средней силы (продолжение)

- вычисляются средние силы:

$$\langle F_i^j \rangle = ((F_i^j)^*(t + \Delta t) + F_i^j(t)) / 2$$

- с их помощью определяются новые значения координат и скоростей:

$$V_i^j(t + \Delta t) = V_i^j(t) + \langle F_i^j \rangle \Delta t / m_a$$

$$R_i^j(t + \Delta t) = R_i^j(t) + \left[ V_i^j(t) + \langle F_i^j \rangle \Delta t / (2m_a) \right] \Delta t$$

## 5.2.5. Задание начальных условий для решения уравнений движения

- **Начальное состояние системы** частиц должно удовлетворять следующим условиям:
  - наличие термодинамического равновесия;
  - внутренняя энергия системы частиц должна иметь кинетическую и потенциальную составляющие.

## 5.2.5. Задание начальных условий для решения уравнений движения

### 1). Задание термодинамического равновесия в системе.

Нужно приписать атомам кристаллита начальные скорости. Скорость каждой частицы в кристаллите – случайная величина, но в целом распределение скоростей должно соответствовать распределению Максвелла для заданной температуры:

$$f(V) = \left( \frac{m_a}{2\pi kT} \right)^{3/2} 4\pi V^2 \exp\left(-\frac{mV^2}{2kT}\right) \quad (8)$$

## 5.2.5. Задание начальных условий для решения уравнений движения

Приписанные скорости при этом должны удовлетворять следующим условиям:

1) не должно быть гидродинамического течения, т.е. нужно, чтобы  $\sum_i \vec{v} = 0$ ;

2) внутренняя энергия системы, которая для твердого тела равна  $3kT$  на одну частицу, есть суммарная кинетическая энергия всех частиц кристаллита:

$$m_a \frac{\langle v^2 \rangle}{2} = 3kT \quad .$$

Выполнение этих условий легко добиться путем линейных преобразований полученного ансамбля скоростей.

## 5.2.5. Задание начальных условий для решения уравнений движения

2). Внутренняя энергия системы частиц должна иметь кинетическую и потенциальную составляющие.

После выполнения этапа 1) есть скорости, соответствующие термодинамическому равновесию в системе. Но все атомы находятся в своих узлах, а внутренняя энергия складывается только из кинетической энергии системы. Так в реальности не бывает.

Нужно получить реальную систему, т.е. кинетическая энергия атомов должна частично перейти в потенциальную, при этом атомы несколько сместятся.

Начинают счет уравнений движения. При этом контролируют среднюю кинетическую энергию системы. Когда она уменьшится примерно на половину и практически не будет меняться, считается, что кристаллит готов к вычислительному эксперименту.