УДК 537.94

Моделювання розплаву свинцю методом молекулярної динаміки

Іван Болеста[1], Андрій Хвищун[2]

[1] д. ф.-м. н., професор, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. ген. Тарнавського, 107, Львів, 79000
[2] Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. ген. Тарнавського, 107, Львів, 79000, e-mail: andr@eleks.com

На основі методу молекулярної динаміки розроблено розрахункову модель і програмний комплекс для дослідження розплавів металів. За початкові положення атомів розплаву обираються вузли гранецентрованої кубічної ґратки, а початкові швидкості атомів задаються згідно розподілу Максвела. Розрахунок руху частинок здійснюється з використанням періодичних граничних умов. Для стабілізації температури системи застосовується термостат Нозе-Гувера. Кількісні дослідження проведено для розплаву свинцю. Прийнято, що частинки взаємодіють згідно потенціалу Васада-Тамаки. Досліджено радіальний розподіл атомів у розплаві.

Ключові слова: розплав свинцю, молекулярна динаміка, програмний комплекс.

Вступ. Сучасні обчислювальні засоби дозволяють проводити розрахунки параметрів руху великої кількості частинок, що взаємодіють між собою. Це використовується, зокрема, при дослідженнях із застосуванням методу молекулярної динаміки (МД) [1-8]. Відзначимо, що відповідні машинні експерименти суттєво здешевлюють наукові дослідження, заміняючи дорогі експерименти над реальними матеріалами.

Об'єктом дослідження в роботі є розплав свинцю, який вивчався методом МД. Була створена відповідна програма в середовищі Delphi для операційної системи Windows. Вона базується на описі руху до 10 000 частинок у тривимірному просторі та дозволяє визначати такі макроскопічні характеристики системи як коефіцієнт дифузії, температуру, криві радіального розподілу.

1. Моделювання систем багатьох частинок методом МД

При моделюванні фізичних (або біологічних) систем методом МД важливе значення має вибір потенціалу взаємодії частинок між собою. У загальному випадку вводяться дистантні, кутові, торсіонні й електростатичні потенціали таким чином, що потенціальна енергія взаємодії між частинками визначається виразом [9]

$$U = U_Д + U_K + U_T + U_E + U_{Емп} \qquad (1)$$

тут $U_Д$, U_K, U_T, U_E — потенціали дистантної, кутової, торсіонної й електростатичної взаємодій, а $U_{Емп}$ — емпірична складова повного потенціалу.

Для опису міжчастинкових взаємодій часто використовуються потенціали Ленарда-Джонса [1]

$$U_{ЛД}(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] \tag{2}$$

та Васада-Тамаки [10]

$$U(r) = \frac{A\cos(Br - C)}{r^3} + De^{-Er}, \tag{3}$$

де σ — ефективний діаметр атома, ε — глибина потенціальної ями, r — відстань між частинками, коефіцієнти A, B, C, D, E вибрані емпірично і залежать від об'єкта досліджень. Для розплаву свинцю ці коефіцієнти мають такі значення: A = 1,9715 еВ нм^3, B = 2,700 нм$^{-1}$, C = 4,2228, D = 7,45·10^5 еВ, E = 7,024 нм$^{-1}$. Потенціал взаємодії U в формулі (3) вимірюється в еВ, а відстань між частинками r — в нм.

Обчислення значень координат і швидкостей атомів проводиться з допомогою МД-алгоритмів інтегрування рівнянь руху із заданими умовами. Згадані алгоритми базуються на схемі Верле [1], яка, по суті, є найпростішою й оборотною в часі

$$\vec{r}\left(t + \Delta t\right) = \vec{r}\left(t\right) + \Delta t\vec{v}\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right), \tag{4}$$

$$\vec{v}\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) = \vec{v}\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) + \Delta t\frac{\vec{f}\left(t\right)}{m}. \tag{5}$$

Тут значення сили $\vec{f}(t)$, яка діє на j-ий атом, отримується на основі одного з наведених вище потенціалів і визначається за формулою

$$\vec{f} = -\frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}U(r)\right]\vec{r}. \tag{6}$$

Слід зазначити, що траєкторії атомів повинні генеруватися в заданому ансамблі, відповідно до тих термодинамічних умов, за яких вивчається система. Розроблено ефективні алгоритми інтегрування, які дозволяють моделювати еволюцію та динаміку системи (від простої атомарної до складної молекулярної) у найрізноманітніших ансамблях (за постійних кількості частинок N, температури T, тиску P, ентропії S, об'єму V) [2].

Для підтримки температури системи поблизу необхідного значення T_f у систему вводять термостат Нозе-Гувера [4]

$$\frac{d\vec{v}(t)}{dt} = \frac{\vec{f}(t)}{m} - k(T)\vec{v}(t), \tag{7}$$

де $\vec{v}(t)$ — швидкість частинки, m — її маса, $\vec{f}(t)$ — сила, яка діє на неї з боку інших частинок, $k(T)$ — коефіцієнт, який залежить від температури системи T.

2. Моделювання розплаву свинцю

Метод МД був використаний для розрахунку макроскопічних характеристик розплаву свинцю. Приймалося, що у вихідній ситуації атоми свинцю розташовані у вузлах гранецентрованої кубічної ґратки. Для досягнення необхідної температури їм надавали випадкових швидкостей згідно максвелівського розподілу. Взаємодія атомів свинцю моделювалася з використанням потенціалів Васада-Тамаки та Ленарда-Джонса.

Моделювання з використанням потенціалу Ленарда-Джонса не дало змоги отримати консервативну систему зі сталою температурою, тому надалі при всіх розрахунках використовували потенціал Васада-Тамаки. Шляхом перебору було встановлено оптимальне значення кроку інтегрування, яке забезпечувало збіжність розрахункової процедури та стабільність системи за температурою. Для контролю роботи програми було використано побудову залежності температури системи від часу (див. рис. 1). При розрахунках приймалося: початкова температура розподілу Максвела $T = 838$ К, маса молекули свинцю — $3{,}453\ 10^{-25}$ кг, кількість частинок — 512, розміри досліджуваного об'єму — 28,0 Å, крок за часом — $2 \cdot 10^{-15}$ с, кількість ітерацій — 1000.

Пік на кривій рис. 1 пов'язаний, очевидно, з вивільненням надлишкової потенціальної енергії, закладеної в систему за впорядкованого розміщення атомів свинцю у вузлах гранецентрованої кубічної ґратки. Подальша хаотизація системи приводить до вивільнення потенціальної енергії та зростання внаслідок цього

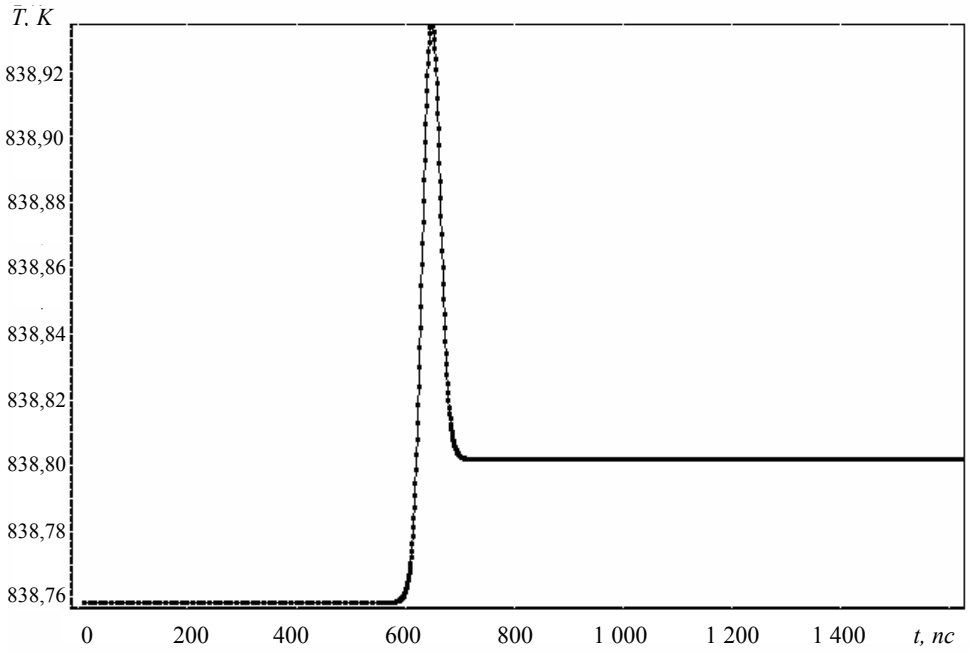

Рис. 1. Залежність температури від часу

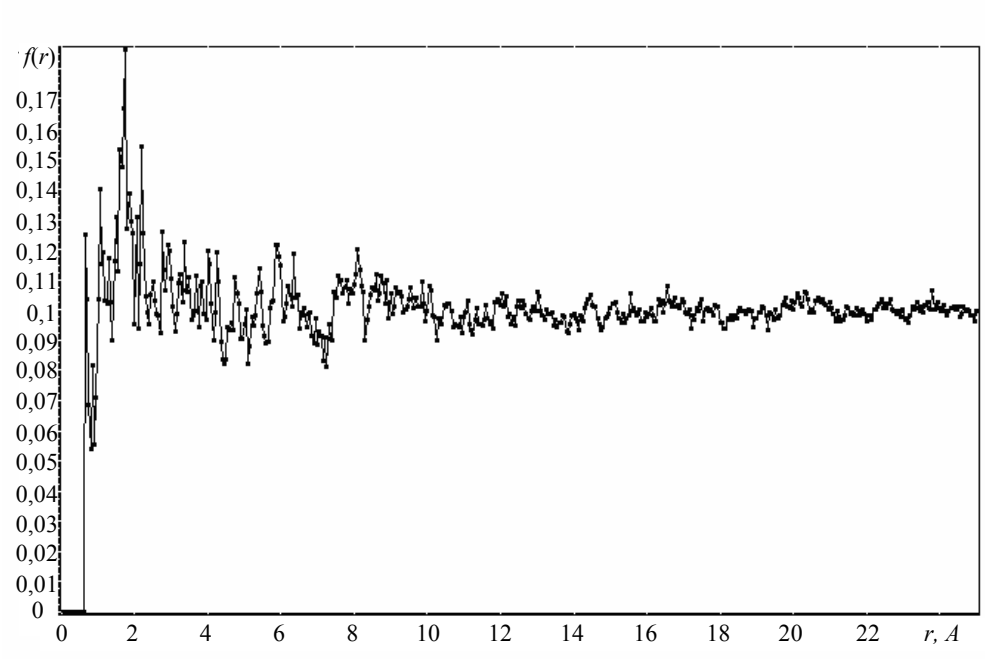

Рис. 2. Радіальний розподіл атомів свинцю

кінетичної. Це проявляється у підвищенні рівня температури, яка підтримується надалі постійною. Таким чином, розроблена програма може бути використана для побудови кривої радіального розподілу атомів і макроскопічних термодинамічних характеристик розплаву свинцю.

Отримана з використанням програмного комплексу крива радіального розподілу наведена на рис. 2. Числові значення вихідних параметрів системи взято такими ж, як і для рис. 1.

Бачимо, що густина ймовірності місцезнаходження атомів свинцю має піки для малих віддалей (порядку одиниць ангстрем), що відображає наявність ближнього порядку в системі атомів. При цьому перший максимум кривої радіального розподілу досягається на відстані, що дорівнює подвоєному радіусу молекули. Відзначимо також, що отримана нами крива радіального розподілу добре узгоджується з відповідними експериментальними даними.

Висновки. З використанням методу молекулярної динаміки створено й апробовано для розплаву свинцю розрахункову модель визначення структурних і термодинамічних характеристик розплавів металів. Показано, що отримані з використанням цієї моделі кількісні результати (для кривої радіального розподілу) узгоджуються з відповідними експериментальними даними.

Література

[1] *Лагарьков А. Н., Сергеев В. М.* Метод молекулярной динамики в статистической физике // УФН. — 1978. — Т. 125, вып. 3. — С. 409-448.

[2] *Allen M. P., Tildesley D. J.* Computer simulation of liquids. — Oxford: Clarendon Press, 1989.

[3] *Young W. L., Sinnott S. B.* Polymerization via cluster — solid surface impacts: molecular dynamics simulations // J. Phys. Chem. B. — 1997. — Vol. 101. — P. 6883.

[4] *Narumi T.* et al. Molecular dynamics machine: Special-purpose computer for molecular dynamics simulations // Molec. Simulation. — 1999. — Vol. 21. — P. 401.

[5] *Smith W., Forester T. R.* Parallel macromolecular simulations and the replicated data strategy I. Computation of atomic forces // Phys. Commun. — 1994. — Vol. 79. — P. 52-62.

[6] *Pan Zh.* Molecular dynamics simulation of slow gold clusters impacting on gold // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. — 1992. — Vol. 66, № 3. — P. 325-332.

[7] *Ihara S., Itoh S., Kitakami J.* Mechanisms of cluster implantation in silicon: A molecular dynamic study // Phys. Rev. B. — 1998. — Vol. 58, № 16. — P. 10736-10744.

[8] *Jorgensen W. L.* et al. Comparison of simple potential functions for simulating liquid water // J. Chem. Phys. — 1983. — Vol. 79, № 2. — P. 926-935.

[9] *Kholmurodov K.* et al. Molecular dynamics simulation of cluster-beam-surface impact processes for metallic phases // J. Сотр. Meth. Sci. Eng. — 2002. — Vol. 2, № 1. — P. 141-147.

[10] *Waseda, Y. and Tamaki S.* The structures of 3d-transition metals in the liquid state // Phil. Mag. — 1975. — Vol. 32. — P. 273-281.

Molecular Dynamics Simulation of Liquid Plumbum

Ivan Bolesta, Andriy Khwyshchun

Computational model and program complex for simulation of liquid metals has been developed based on molecular dynamics method. Cells of face centered cubic lattice have been taken as initial placement of atoms. Initial speed of atoms has been set due to Maxwell's distribution. Periodical boundary conditions have been used for atomic movement's calculations. Nose-Hoover thermostat has been used for temperature stabilizing. Investigations have been performed for liquid plumbum. Atomic interactions have been simulated using Waseda-Tamaki potential. Atomic radial distribution has been studied.

Моделирование расплавленного свинца методом молекулярной динамики

Иван Болеста, Андрей Хвищун

На основании метода молекулярной динамики разработана расчетная модель и программный комплекс для исследования расплавов металлов. В качестве начальных положений атомов расплава были выбраны узлы гранецентрированной кубической решетки, а начальные скорости атомов задавались согласно распределению Максвелла. Расчет движения частиц проводился с использованием периодических граничных условий. Для стабилизации температуры системы использован термостат Нозе-Хувера. Количественные исследования проведены для расплава свинца. Принято, что взаимодействие частиц описывается потенциалом Васада-Тамаки. Изучено радиальное распределение атомов в расплаве.

Отримано 16.01.06