

## Секция «Вычислительная математика и кибернетика»

Алгоритм моделирования теплофизических свойств металлов методами  
молекулярной динамики

*Подрыга Виктория Олеговна*

*Аспирант*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Факультет  
вычислительной математики и кибернетики, Москва, Россия*

*E-mail: pvictoria@list.ru*

Приведение системы атомов металла к состоянию равновесия является обязательным условием при выполнении расчетов, связанных с получением свойств металлической материи при критических условиях, таких как изучение процессов абляции под действием фемтосекундного лазера и разрушения структуры металла, исследование характеристик плавления металлов – задач с изменением термических условий. Для актуальных в современных исследованиях физических проблем такого рода образец должен быть подготовлен специальным образом - находиться в состоянии термодинамического равновесия при выбранной температуре, необходимой для начала расчета.

В данной работе методом молекулярной динамики (МД) рассмотрено моделирование системы частиц, состоящей из атомов алюминия. Исследован процесс установления равновесного распределения атомов по скоростям при необходимом температурном режиме.

В методе МД исследуемая система представляется совокупностью взаимодействующих атомов или молекул, движущихся по законам классической механики. Таким образом, эволюция системы таких частиц отслеживается путем интегрирования их уравнений движения, описываемых законом Ньютона.

Начальные условия задачи включают в себя координаты и скорости рассматриваемых атомов. Исследуется модель в геометрии бесконечной пластины. Для ее моделирования вдоль координатных осей  $x$  и  $y$  использовались периодические граничные условия. В направлении оси  $z$  пластина конечна и здесь ставится условие свободных границ.

При моделировании методом МД силы межатомного взаимодействия представляют в форме потенциальных сил. Для их описания используется так называемый потенциал погруженного атома. В данной работе он рассматривается в аналитической форме, предложенной в работе [3].

Алгоритмы интегрирования уравнений движения основаны на разностной схеме Л. Верле [2].

Целью задачи является исследование равновесного состояния рассматриваемого твердого тела (пластины алюминия) при определенной температуре, для чего необходимо осуществить тепловое воздействие на образец. Температура системы поддерживается за счёт энергообмена с внешней средой. Детальный учет взаимодействия с ней системы атомов часто невозможен, поэтому для моделирования такого механизма используются специальные алгоритмы – термостаты.

В качестве метода достижения желаемой температуры системы был выбран термостат Г. Берендсена [1], который основан на введении знакопеременного трения. В

этом методе взаимодействие с тепловым резервуаром не учитывается явным образом, а задается аналитически путем масштабирования скоростей.

В рамках данной работы создана молекулярно-динамическая программа, позволяющая рассчитывать характеристики металла на основе аналитической формы потенциала погруженного атома. С ее помощью исследован процесс установления равновесного распределения атомов по скоростям при необходимом температурном режиме.

### **Литература**

1. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., W.F. van Gunsteren et al. Molecular dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys., 1984. V. 81. P. 3684-3690.
2. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. Academic Press, 2002.
3. Zhakhovskii V. V., Inogamov N. A., Petrov Yu. V., Ashitkov S. I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // Applied Surface Science, 2009. V. 255. P. 9592-9596.