

А.С. Васин

# Компьютерный эксперимент в физике

Практикум

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
"Национальный исследовательский  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского"

**А.С. Васин**

# **Компьютерный эксперимент в физике**

## **Практикум**

Рекомендовано методической комиссией физического факультета  
для студентов магистратуры физического факультета ННГУ,  
обучающихся по направлениям подготовки  
09.04.02 «Информационные системы и технологии»,  
03.04.02 «Физика»,  
11.04.04 «Электроника и нанoeлектроника»

3-е издание, исправленное и дополненное

Нижегород

2024

УДК 159.6

ББК В19

В-19

В-19 Васин А.С. КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ В ФИЗИКЕ: Практикум. – 3-е изд. исправл. и доп. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2024. – 66 с.

Рецензент: кандидат физ.-мат. наук, доцент **Перов А.А.**

Пособие предназначено для студентов 1 курса магистратуры физического факультета, изучающих курс “Математическое моделирование физических процессов”. В нем изложены некоторые теоретические сведения по указанной дисциплине, приведены методические указания по разработке алгоритмов и составлению программ, а также задания по разделам “Метод молекулярной динамики ” и “Методы Монте-Карло”.

Ответственный за выпуск:  
председатель методической комиссии  
физического факультета, к.ф.-м.н., доц. Перов А.А.

УДК 159.6  
ББК В19

А.С. Васин

© Нижегородский государственный университет  
им. Н.И Лобачевского, 2024

## Содержание

Введение . . . . .	6
1.Метод молекулярной динамики . . . . .	7
1.1. Методические указания . . . . .	7
1.1.1. Начальное размещение частиц . . . . .	7
1.1.2. Моделирование движения частиц . . . . .	9
1.1.3. Обеспечение периодических граничных условий . . . . .	10
1.1.4. Проверка сохранения полной энергии и выбор шага по времени .	11
1.1.5. Использование размерных величин . . . . .	12
1.1.6. Графическое представление результатов моделирования . . .	12
1.1.7. Требования к отчету по задаче . . . . .	13
1.2. Задачи . . . . .	14
1.2.1. Исследование влияния Луны и Солнца на движение искусственных спутников Земли . . . . .	14
1.2.2. Моделирование аргоноподобного двумерного газа частиц с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса . . . . .	17
1.2.3. Моделирование испарения двумерной капли жидкости. . . .	18
1.2.4. Исследование распределения по скоростям молекул двумерного идеального газа . . . . .	19
1.2.5. Исследование температурной зависимости внутренней энергии двумерной системы частиц в каноническом ансамбле .	21
1.2.6. Получение уравнения состояния идеального двумерного газ .	22
1.2.7. Исследование простых свойств переноса системы частиц . .	24
1.2.8. Исследование поведения двумерной системы частиц при охлаждении . . . . .	25
1.2.9. Исследование аморфизованного состояния двумерной системы частиц с помощью функции радиального распределения . . .	27
1.2.10. Моделирование фазового перехода 1-го рода в двумерной системе частиц . . . . .	28

1.2.11. Определение энергии образования вакансии в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Вуксевича . . . . .	32
1.2.12. Определение энергии образования вакансии в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Стиллинджера-Вебера . . . . .	34
1.2.13. Определение энергии образования собственного междоузельного атома в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Терсоффа . . . . .	35
2. Методы Монте-Карло . . . . .	36
2.1. Методические указания . . . . .	36
2.2. Задачи . . . . .	41
2.2.1. Проверка генератора случайных чисел . . . . .	41
2.2.2. Одномерные случайные блуждания . . . . .	43
2.2.3. Случайные блуждания частиц на двумерной решетке . . . . .	45
2.2.4. Исследование двумерного распределения частиц при диффузии с поверхности. Метод случайных блужданий . . . . .	46
2.2.5. Моделирование диффузии нейтронов через пластинку . . . . .	49
2.2.6. Двумерный ядерный реактор . . . . .	51
2.2.7. Модель Изинга на квадратной решетке для ферромагнетика с переворотом спина в каноническом ансамбле . . . . .	54
2.2.8. Модель Изинга для магнетика на квадратной решетке с динамикой Кавасаки . . . . .	56
2.2.9. Модель Изинга для бинарного сплава на квадратной решетке в каноническом ансамбле . . . . .	57
2.2.10. Модель Изинга для бинарного сплава с ПК решеткой в каноническом ансамбле . . . . .	58
2.2.11. Моделирование роста грани простого кубического кристалла . . . . .	59
2.2.12. Моделирование ионной имплантации . . . . .	60

Приложение . . . . .	61
Литература . . . . .	65

# ВВЕДЕНИЕ

Компьютерный эксперимент в физике – бурно развивающаяся область науки, находящаяся на стыке теоретических и экспериментальных исследований. Его возможности постоянно расширяются по мере развития компьютерной техники, в первую очередь, по мере увеличения быстродействия и оперативной памяти компьютеров и организации параллельных вычислений. Компьютерный эксперимент, так или иначе, присутствует во всех направлениях современной физической науки, охватить которые в небольшом учебном курсе практически невозможно. Поэтому мы рассмотрим только некоторые разделы физики, которые, на наш взгляд, наиболее ярко и просто демонстрируют возможности компьютерного моделирования.

В настоящем методическом пособии рассмотрены задачи, возникающие при моделировании движения системы взаимодействующих частиц, а также некоторые задачи физики твердого тела, решаемые на основе генерирования случайных чисел (метод Монте-Карло). В каждой части пособия приведены методические указания к решению задач и тексты задач. В конце помещены справочные данные о потенциалах межатомного взаимодействия и литература.

Прежде чем составлять программу расчетов, студент должен ознакомиться с лекционным материалом и приведенными методическими рекомендациями, причем не только по своей задаче, а по всему разделу. Разработанная программа должна иллюстрировать изучаемое явление и выдавать его характеристики, указанные в задании.

В третьем издании переработаны отдельные задачи и добавлены новые, а также устранены некоторые неточности.

# 1. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

## 1.1. Методические указания

Моделирование движения системы частиц может быть проведено по следующему алгоритму.

### 1.1.1. Начальное размещение частиц

Для каждой частицы следует задать начальные координаты и компоненты скорости в соответствии с условиями конкретной задачи. В случае моделирования газа или жидкости для упрощения последующего программирования частицы можно расположить в квадратной решетке с периодом, немного отличающимся от равновесного расстояния между двумя частицами. Для микроканонического ансамбля изменением этого периода можно регулировать конечную установившуюся температуру системы. Для двумерного или трехмерного кристалла координаты следует задавать исходя из вида кристаллической решетки. Сначала следует задать координаты атомов в элементарной ячейке, затем размножить эту ячейку на плоскости или в пространстве.

Другой вариант размещения частиц – случайное разбрасывание их по расчетной ячейке. Однако в этом случае необходимо следить за тем, чтобы центры частиц не оказались на расстоянии ближе  $0.85 \div 0.9$  от равновесного, иначе на первом же шаге по времени между частицами возникают очень большие силы и они покидают расчетную ячейку.

Для быстрого перехода системы к равновесному состоянию следует задать начальные скорости частиц, случайно распределенные по величине и направлению. Для этого подойдет, например, такой алгоритм (движение в плоскости):

$$\begin{aligned}
 V_{0x} &= V_0 \cdot r_1 \cdot \cos(2\pi \cdot r_2), \\
 V_{0y} &= V_0 \cdot r_1 \cdot \sin(2\pi \cdot r_2),
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

где  $r_1, r_2$  – равномерно распределенные случайные числа из интервала  $[0, 1]$ ,  $V_0$  – условная начальная скорость. При этом суммарный импульс системы все равно будет немного отличаться от нуля. Чтобы его полностью занулить, нужно определить средние проекции скоростей  $\Sigma V_{0xi}/N, \Sigma V_{0yi}/N, (i = 1..N$  – номер частицы) и вычесть их из  $V_{0xi}, V_{0yi}$ , соответственно.

Изменяя величину  $V_0$ , можно регулировать установившуюся температуру системы. В задачах, где требуются исследования при постоянной температуре  $T$ ,  $V_0$  задается примерно в два раза больше среднеквадратичной скорости частиц  $V_{кв}$ . Как известно,  $mV_{кв}^2/2 = dkT/2$ , где  $m$  – масса частицы,  $k$  – постоянная Больцмана,  $d$  – мерность пространства.

При моделировании дефектов в кристалле частицы располагаются в узлах соответствующей кристаллической решетки, а их скорости зануляются. Для задания координат атомов в алмазной решетке нужно внимательно ознакомиться с ее строением. Можно, например, задать координаты атомов в одной элементарной ячейке, а потом периодически продолжить необходимое число ячеек по осям  $x, y, z$ . Можно попытаться задать координаты для всех атомов расчетной ячейки сразу, используя 3-мерный массив. В этом случае часть элементов массива останутся нулевыми, т.к. не все узлы алмазной решетки совпадают с узлами простой кубической решетки, отвечающей трехмерному массиву. Возможны и другие способы задания координат атомов в алмазной решетке.

В случае применения потенциала Вуксевича [11] для каждого атома необходимо сформировать массивы номеров его первых и вторых соседей. При этом в движении могут участвовать только атомы, имеющие и первых, и вторых соседей. Это требование исключает из движения 2 приграничных слоя атомов расчетной ячейки.

В случае применения потенциала Стиллинджера-Вебера [12] или Терсоффа [13] для каждого атома нужно сформировать группу номеров атомов-соседей, отстоящих от данного атома на расстояние, меньшее  $(1.2 \div 1.3)R$ , где  $R$  – радиус обрезания потенциала. При последующем расчете энергии системы частиц следует перебирать для каждого атома возможные пары и тройки только из этой группы.

### 1.1.2. Моделирование движения частиц

Расчет координат и скоростей для всех  $N$  частиц на текущем шаге по времени может быть выполнен, например, по алгоритму Верле в скоростной форме:

$$\begin{aligned} (x_i^j)_{k+1} &= (x_i^j)_k + (V_i^j)_k \cdot \Delta t + \frac{(F_i^j)_k}{2m} \cdot (\Delta t)^2, \\ (V_i^j)_{k+1} &= (V_i^j)_k + \frac{(F_i^j)_{k+1} + (F_i^j)_k}{2m} \cdot \Delta t, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $k = 1, 2, \dots, k_{max}$  – номер шага по времени,  $i = 1, 2, \dots, N$ ,  $j = 1, 2$  для движения в плоскости или  $j = 1, 2, 3$  для движения в пространстве ( $1 \equiv x$ ,  $2 \equiv y$ ,  $3 \equiv z$ ),  $\Delta t$  – величина шага по времени,  $m$  – масса частицы,  $F_i^j$  –  $j$ -ая проекция силы, действующей на  $i$ -ю частицу со стороны всех других частиц.

$(F_i^j)_{k+1}$  вычисляется на каждом новом временном шаге после

определения  $(x_i^j)_{k+1}$ :  $(F_i^j)_k = -\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i^j}\right)_k$ , где  $U_i$  – потенциальная энергия

взаимодействия  $i$ -ой частицы со всеми остальными частицами.

В случае простых потенциалов межатомного взаимодействия частные производные могут быть вычислены аналитически. Например, для потенциала Леннарда-Джонса (см. Приложение)

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i^j} = -12D \cdot a^6 \cdot \sum_k \left[ \frac{a^6}{(r_{ik})^6} - 1 \right] \cdot \frac{x_i^j - x_k^j}{(r_{ik})^8}, \quad (3)$$

где  $(r_{ik})^2 = (x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2$  – квадрат расстояния между центрами  $i$ -го и  $k$ -го атомов,  $a$  – равновесное расстояние между атомами,  $D$  – глубина потенциальной ямы на графике.

В случае использования модифицированного потенциала Леннарда-Джонса обрезающий множитель  $K(r)$  можно не дифференцировать, а просто умножить на него правую часть в формуле(3).

При использовании сложных по форме потенциалов (Вуксевича, Стиллинджера-Вебера или Терсоффа) вместо аналитического вычисления производных может оказаться более выгодным численное дифференцирование выражения  $U_i = \sum_k U_{ik}$  при задании  $dx, dy, dz$  примерно  $\pm 0.01a$ . Вполне подойдут формулы 5-ти или 3-х точечного численного дифференцирования для центрального узла.

### 1.1.3. Обеспечение периодических граничных условий

В большинстве задач для моделирования газов или жидкостей применяются периодические граничные условия. Они необходимы для сохранения числа движущихся частиц в расчетной ячейке и для имитации условия, чтобы у каждой частицы были первые, вторые и т.д. соседи. Если на текущем шаге по времени получаются координаты частицы за пределами расчетной ячейки (частица пересекает границу), то их необходимо изменить так, чтобы частица с тем же направлением скорости появилась с другой стороны расчетной ячейки. Для этого применяется такой алгоритм.

После расчета  $x = (x_i^j)_{k+1}$  следует сделать проверку и изменить координаты:

если  $x < 0$ , то  $x = x + Lx$ ,

если  $x > Lx$ , то  $x = x - Lx$ ,

где  $x$  – это  $x$  или  $y$ , или  $z$ ,  $Lx$  – размер расчетной ячейки по координатам  $x$  или  $y$ , или  $z$ .

Кроме того, при расчете сил нужно учитывать и частицы, находящиеся от данной частицы по другую сторону границы расчетной ячейки. Это можно сделать так. Вычисляется

$$dx = x_i - x_k;$$

если  $|dx| > Lx/2$ , то  $dx = dx - \text{sign}(dx) \cdot Lx$ ,

где

$$\text{sign}(dx) = \begin{cases} 1, & \text{при } dx > 0 \\ -1, & \text{при } dx < 0 \end{cases} \text{ – функция знака.}$$

(Подробнее смотрите [1], стр. 155, подпрограмма *separation*.)

#### 1.1.4. Проверка сохранения полной энергии и выбор шага по времени

Выбор шага по времени основан на эмпирическом правиле:  $\Delta t = (0.001 \div 0.01) \cdot \tau$ , где  $\tau$  – характерное время задачи. Для атомных систем  $\tau$  – это величина порядка периода колебания частицы в потенциальной яме (смотрите задачу 1.2.2).

Для проверки правильности работы программы необходимо контролировать выполнение закона сохранения энергии: при усреднении по каждым  $50 \div 100$  шагам по времени сумма кинетической и потенциальной энергии движущихся частиц должна оставаться постоянной с точностью в несколько процентов. Естественно, что такая проверка должна выполняться в условиях микроканонического ансамбля частиц.

При правильном программировании разработанного алгоритма движения окончательный выбор шага по времени должен исходить из этого же критерия.

Чем больше средние скорости частиц и температура системы, тем меньше должен быть шаг по времени. Добившись заданной точности при различных начальных условиях, следует еще уменьшить шаг по времени в 2-5 раз и с этим шагом проводить дальнейшие вычисления необходимых средних значений.

### **1.1.5. Использование размерных величин**

При моделировании физических процессов, как правило, проводят обезразмеривание задачи. В этом случае длина, масса, скорость, энергия и т.д. задаются и рассчитываются в некоторых условных единицах. Однако для лучшего понимания физики изучаемого явления и простоты программирования студентам можно посоветовать использовать размерные величины. При этом все физические константы и параметры задачи следует указывать в какой-либо одной системе единиц, например, в СИ или СГС. Во всех современных языках программирования и системах вычислительной математики диапазон представления вещественных чисел позволяет это сделать. Однако выводить окончательные результаты расчетов, конечно же, удобнее в электрон-вольтах, нанометрах, пикосекундах и т.д.

### **1.1.6. Графическое представление результатов моделирования**

В задачах по молекулярной динамике обязательно показывать положение частиц на определенных шагах по времени. При удачном подборе шага по времени, числа шагов  $n_B$ , через которое выводятся кадры «мультфильма» и, возможно, величины задержки во времени при прорисовке, можно получить вполне естественную картину движения частиц без рывков и затянутостей. При числе частиц менее 100 компьютер довольно быстро рассчитывает новые координаты и скорости, поэтому кадры «мультфильма» можно выводить чаще. При увеличении числа частиц

скорость расчетов резко замедляется, вывод картинки следует делать без задержек, увеличивая  $n_B$ . Частицы удобно рисовать в виде незакрашенных кружков так, чтобы диаметр кружка соответствовал равновесному расстоянию между частицами.

Интерфейс программы должен позволять изменять параметры задачи (число частиц, начальные координаты и скорости, начальное взаимное расположение, шаг по времени и т.д.) без перекомпиляции.

Формулы для потенциалов межатомного взаимодействия и их параметры приведены в Приложении.

### **1.1.7. Требования к отчету по задаче**

По каждой задаче должен быть составлен и сдан в распечатанном виде отчет, содержащий следующие разделы.

1. Титульный лист.
2. Формулировка задачи (1-2 абзаца текста без формул, излагающие суть поставленной задачи).
3. Физическая постановка задачи (используемые физические законы, записанные с помощью формул, сопровождаемые рисунком и пояснениями).
4. Математическая постановка задачи (формулы численных методов, используемые для последующего программирования, указание выбранных интервалов задаваемых и рассчитываемых физических величин, обоснование выбора параметров задачи, описание контроля параметров для получения заданной точности).
5. Алгоритм программы, описанный либо в виде структурной блок-схемы, состоящей из крупных блоков, отражающих основные этапы решения, либо в виде перечисления последовательности этих этапов.
6. Результаты тестирования программы в виде графиков, таблиц, диаграмм, полученных при наиболее характерных для данной задачи

исходных данных, и подтверждающие правильность решения. Все иллюстративные материалы должны иметь подписи, кратко характеризующие рисунок или график. На осях графиков должны быть указаны соответствующие физические величины и единицы их измерения.

7. Другие интересные, с вашей точки зрения, результаты расчетов и их обсуждение.
8. Выводы по проделанной работе.
9. Список используемой литературы.

Отчет может быть оформлен в MS WORD. В него могут быть импортированы рисунки из графического редактора Paint, или других средств визуализации, таблицы и графики из Excel, Математики и т.д. Примерный объем отчета – 8-10 страниц формата А4. В зависимости от особенностей задачи указанные выше пункты могут быть частично опущены или дополнены другими по вашему усмотрению.

## **1.2. Задачи**

### **1.2.1. Исследование влияния Луны и Солнца на движение искусственных спутников Земли**

Рассмотреть систему частиц, состоящих из спутника, Земли, Луны и Солнца. Начало системы координат поместить в центр Солнца и считать Солнце неподвижным. Пусть Земля, Луна и спутник движутся относительно Солнца в одной плоскости. Реально плоскость орбиты Луны отклоняется от плоскости эклиптики всего на  $4.5^\circ - 5.5^\circ$ . Наклонение орбиты спутников к плоскости экватора Земли может быть от  $0^\circ$  (геостационарные спутники) до  $90^\circ$  (полярные спутники). Поэтому такое предположение вполне правдоподобно.

Земля вокруг Солнца и Луна вокруг Земли движутся по почти эллиптическим траекториям, близким к круговым. На самом деле вокруг Солнца почти по эллипсу движется центр масс системы Земля-Луна, лежащий в 4700 км от центра Земли. Расстояние между центрами Земли и Луны изменяется 356.4 до 406.8 тыс. км: среднее расстояние составляет 385 тыс. км, средний эксцентриситет лунной орбиты 0.055. Расстояние от Земли до Солнца изменяется от 147.1 до 152.1 млн. км, средний эксцентриситет земной орбиты 0.0167. Эти значения не очень точные и изменяются во времени из-за влияния других планет солнечной системы. Поэтому для исследования влияния Луны и Солнца на движение спутника можно задать начальные положения Земли и Луны, соответствующие средним расстояниям, а начальные скорости – средним скоростям орбитального движения.

Солнце, Землю, Луну считать идеальными твердыми шарами, спутник считать материальной точкой с малой массой. Влиянием атмосферы на движение спутника пренебречь.

### *Задания*

1. Смоделировать движение спутника вокруг Земли без учета влияния Солнца и Луны, численно интегрируя дифференциальные уравнения движения: а) по алгоритму Верле; б) методом Рунге-Кутты 4 порядка; в) в пакете Mathematica с помощью функции NDSolve. Начало системы отсчета в этом случае удобней взять в центре Земли и считать её инерциальной.

Рассмотреть 3 вида орбит спутников: А – низкоорбитальная круговая на высоте 500 км от поверхности Земли; Б – геостационарная; В – сильно вытянутая эллиптическая типа орбиты спутников "Молния" с периодом обращения 12 часов.

Для каждой орбиты определить оптимальный шаг по времени для достижения примерно одинаковой точности в каждом методе. (Для NDSolve имеется опция StartingStepSize, задающая начальный шаг по времени. См. Help.) Траектории рассчитывать не менее чем за 5 оборотов. Показывать

траектории целиком, а также в укрупненном масштабе вблизи перигея и апогея. Спутник "запускать" из точки перигея (в силу приближенного задания начальных условий и численного интегрирования абсолютно круговых орбит не получится). Рассчитывать кинетическую, потенциальную и полную энергию спутника и проверять закон сохранения энергии.

Удобно координаты записывать в текстовый файл, потом переносить их, например, в Excel и строить графики траекторий в нужном диапазоне координат. Получается быстро и наглядно. Такой способ позволяет выделить траектории на различных витках и определить их различие с точностью до сотен метров. Важнейшим условием является применение переменных и констант двойной точности при программировании.

*Замечание.* Число шагов по времени может достигать десятков тысяч. Поэтому вывод координат в файл можно делать через 2, 4, 8 и т.д. шагов по времени.

2. Смоделировать движение спутника, Земли и Луны с учетом влияния их друг на друга в системе отсчета, связанной с центром Солнца. Окончательные координаты для построения траекторий спутника и Луны пересчитать относительно Земли. Использовать метод Рунге-Кутты 4 порядка. Рассмотреть 3 случая начального взаимного расположения системы спутник-Земля-Луна-Солнце (рис. 1). Получить график траектории Луны вокруг Земли, а также графики траектории спутника относительно Земли вблизи апогея и перигея. Смоделировать не менее 5 оборотов спутника вокруг Земли.

Используя результаты пункта 1, определить смещение спутника в перигее и апогее из-за влияния Луны и Солнца для каждого типа орбиты при 3-х начальных условиях, соответствующих рис. 1. Достаточно ли точности расчетов для таких оценок?

3. Исследовать возможность достижения наилучшей точности моделирования при большом числе оборотов. Например, можно рассмотреть

интервал времени одного оборота Луны вокруг Земли. Выделить главные факторы накопления ошибок моделирования.

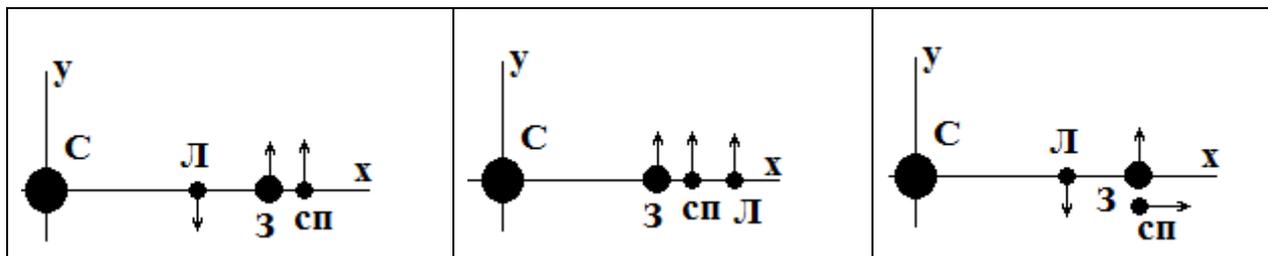


Рис. 1. Возможные начальные положения тел. *C* – Солнце, *З* – Земля, *Л* – Луна, *сп* – спутник. Стрелками показаны направления скоростей (для спутника и Луны – относительно Земли). Масштаб не соблюден

### 1.2.2. Моделирование аргоноподобного двумерного газа частиц с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса

Смоделировать движение системы аргоноподобных частиц на плоскости в прямоугольной расчетной ячейке размером  $L_x = 2L = 40a$ ,  $L_y = L = 20a$ , где  $a$  – параметр модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (равновесное расстояние между частицами). Разреженному газу соответствует плотность частиц  $\rho = N/2L^2 = (0.1 \div 0.2)/a^2$ , т.е. в ячейке нужно разместить примерно  $N=100$  частиц. Шаг по времени взять  $(0.01 \div 0.02) \cdot \tau$ , где характерное время  $\tau = (\frac{ma^2}{D})^{1/2} \approx 2 \cdot 10^{-12} c$ ,  $D$  – параметр потенциала,  $m$  – масса частицы. Рассмотреть: а) периодические граничные условия; б) отражение частиц от границ расчетной ячейки по законам упругого удара.

#### Задания

1. Качественно исследовать зависимость конечного состояния системы от начальной конфигурации, скорости частиц и их плотности. Взять примерно  $10^3$  шагов по времени. Определить конечную температуру системы. От чего она зависит?

а) Расположить частицы в узлах прямоугольной сетки или случайным образом в одной половине расчетной ячейки (например, левой) и задать нулевые скорости.

б) То же самое при случайно заданных компонентах скоростей, равномерно распределенных в интервалах  $-V_{\max} < V_{xi} < V_{\max}$ ,  $-V_{\max} < V_{yi} < V_{\max}$ ,

где  $i = 1, \dots, N$ ;  $V_{\max} = k \cdot \left(\frac{D}{m}\right)^{1/2} \approx k \cdot 160 \text{ м/с}$ , где  $k = 0.2 \div 2$ .

2. Количественно оценить время установления равновесия в системе в пункте 1б при условии отражение частиц от границ расчетной ячейки по законам упругого удара. Для этого, например, можно получить зависимость от времени (номера шага) числа частиц  $n$ , находящихся в левой половине ячейки. Эту зависимость можно аппроксимировать спадающей экспонентой со временем релаксации  $t_p$ :  $n(t) = \frac{N}{2} \cdot (1 + \exp(-t/t_p))$ . За время установления можно принять  $3t_p$ . Исследовать зависимость времени установления от  $V_{\max}$ .

3. Проверить правильность выбора шага по времени по закону сохранения энергии. Для этого выводить графики потенциальной и кинетической энергии и их суммы в расчете на одну частицу в зависимости от шага по времени. Определить максимально возможный шаг по времени, при котором средняя энергия флуктуирует не более, чем на 5%. Усреднение проводить на каждых 10-20 шагах по времени или применить скользящее среднее.

4. Если позволяют возможности компьютера, увеличьте размеры расчетной ячейки в 2 раза, а число частиц в 4 раза. Что изменится в результатах?

### 1.2.3. Моделирование испарения двумерной капли жидкости

Взаимодействие между частицами описывать модифицированным потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами аргона. Расчетную ячейку взять в форме квадрата со сторонами  $L_x = L_y = 30a$ , где  $a$  – параметр модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (равновесное расстояние

между частицами). Шаг по времени взять  $0.01\tau$  (задача 1.2.2), применить периодические граничные условия.

Смоделировать «каплю жидкости», первоначально расположив частицы в центре расчетной ячейки в квадратной решетке с периодом  $b = (0.9 \div 1.5)a$ . Задать нулевые начальные скорости частиц. Удобно взять 16, 25 или 36 частиц.

#### *Задания*

1. Проследить поведение системы в течение примерно 5000 шагов по времени, выводя на экран «мгновенные снимки», например, через 20 шагов и определяя начальную потенциальную энергию, среднюю энергию частиц за 20 шагов, среднюю температуру  $T_{cp}$  системы (усреднение по температуре начинать не ранее 500-го шага). Основным параметром задачи является начальное расстояние  $b$  между частицами. От него, в конечном счете, зависит энергия и установившаяся температура, а значит и скорость «испарения» капли. Качественно объяснить поведение системы в зависимости от  $b$ ,  $T_{cp}$ .
2. Определить температуру  $T_1$ , при которой капля полностью испаряется, т.е. атомы движутся по отдельности, а не в виде групп из нескольких атомов.
3. Исследовать зависимость скорости испарения капли от температуры при различных начальных значениях размера капли. Рассмотреть интервал температур от нуля до  $T_1/2$ . За скорость испарения можно принять число частиц, оторвавшихся от капли за определенное число шагов по времени. Нельзя ли оценить интенсивность испарения каким-либо другим способом?

#### **1.2.4. Исследование распределения по скоростям молекул двумерного идеального газа**

Взаимодействие между частицами описывать модифицированным потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами аргона. Расчетную ячейку взять в форме квадрата со сторонами  $L_x = L_y = 30a$ , где  $a$  – параметр модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (равновесное расстояние

между частицами). Шаг по времени взять  $0.01\tau$  (задача 1.2.2), применить периодические граничные условия.

В расчетной ячейке расположить  $N$  частиц по вашему усмотрению, но так, чтобы их движение через 100-200 шагов от начала отсчета времени напоминало движение молекул идеального газа. Для этого  $N$  не должно быть слишком мало (иначе частицы не будут взаимодействовать) и  $N$  не должно быть слишком велико (иначе это будет не «идеальный газ»). Задать начальные скорости частиц.

### Задания

1. Подобрать число частиц  $N$  и подходящую установившуюся температуру системы, изменяя, начальное расстояние между частицами или начальные скорости частиц.
2. Выполнить примерно 500 шагов по времени и определить максимальную скорость  $V_{max}$  частиц, выводя «мгновенные снимки» системы на экран на каждом временном шаге. Для получения гистограммы распределения по скоростям интервал от 0 до  $2V_{max}$  разбить на 50 подинтервалов длиной  $\Delta V = 2V_{max}/50$ . На последующих  $(1\div 5)\cdot 10^4$  шагах подсчитывать число частиц, имеющих скорости от  $i\cdot\Delta V$  до  $(i+1)\cdot\Delta V$ ,  $i = 0,1,2, \dots, 49$ , занося их в массив  $n(i)$ . Определить средние значения  $n(i)$  за эти шаги и занести их в массив  $nsr(i)$ . Отнормировать массив  $nsr(i)$ , поделив каждое значение на число частиц. Вывести массив  $nsr(i)$  в файл. Построить график зависимости  $nsr(i)$  от  $i$ . Сравнить полученную зависимость с распределением Максвелла молекул идеального газа по скоростям. При усреднениях «мгновенные снимки» системы можно не выводить.
3. Задавая различные начальные конфигурации частиц и определяя среднюю температуру системы по последним  $(1\div 5)\cdot 10^4$  шагам, получить распределение Максвелла при 3-х температурах и построить их на одном графике. Поскольку положение максимума на распределении пропорционально  $\sqrt{T}$ , следует подобрать эти температуры в соотношении

примерно 1:4:9. Для каждой температуры построить на том же графике теоретическое распределение. Найти наиболее вероятные и средние значения скоростей и сравнить их с теоретическими значениями.

*Замечание.* Если задать начальные скорости всех частиц равными  $V_0$ , (смотрите задачу 1.2.10), то для двумерного идеального газа теоретическое распределение Максвелла имеет вид

$$f(V) = \frac{2V}{V_0^2} \cdot e^{-V^2/V_0^2}. \quad (4)$$

### 1.2.5. Исследование температурной зависимости внутренней энергии двумерной системы частиц в каноническом ансамбле

Взаимодействие между частицами описывать модифицированным потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами аргона. Расчетную ячейку взять в форме квадрата  $L_x = L_y = 20a$ , где  $a$  – параметр модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (равновесное расстояние между частицами). Шаг по времени взять  $0.01\tau$  (задача 1.2.2), применить периодические граничные условия.

Расположить  $64 \div 225$  частиц в центре расчетной ячейки в квадратной решетке с периодом  $b = (1.2 \div 1.5) \cdot a$ . Задать почти нулевые начальные скорости частиц.

#### *Задания*

1. Получить зависимость внутренней энергии системы (т.е. суммы потенциальной и кинетической энергии) от температуры. Для достижения требуемой температуры системы на начальных 5000 шагах по времени производить перенормировку скоростей на каждом десятом шаге по формуле

$$V_{\alpha i}^{(нов)} = \beta \cdot V_{\alpha i}^{(стар)}, \text{ где } \alpha = x \text{ или } y, i = 1, 2, \dots, N, \quad \beta = \sqrt{\frac{2NkT_{зад}}{\sum_{i=1}^N \langle m_i V_i^2 \rangle}},$$

$T_{зад}$  – заданная температура,  $k$  – постоянная Больцмана,  $V_i^2 = V_{ix}^2 + V_{iy}^2$ , а угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  означают усреднение по 10 шагам.

После достижения системой равновесия (за, примерно, 2000 шагов) перенормировку скоростей не производить и определить температуру системы, её кинетическую и полную энергию усреднением по последующим 10000 шагам. Построить графики зависимостей полной  $E$  и средней кинетической  $\langle E_K \rangle$  энергий от температуры  $T$  во всем возможном интервале температур при 2-3 значениях  $N$ . Чем определяется этот интервал и почему он не бесконечный?

2. Численным дифференцированием сглаженных зависимостей, полученных в п.1, определить удельные теплоемкости

$$C_V = \frac{1}{N} \cdot \left( \frac{dE}{dT} \right)_V \quad \text{и} \quad C_{VK} = \frac{1}{N} \cdot \left( \frac{d \langle E_K \rangle}{dT} \right)_V. \quad (5)$$

При каких условиях  $C_V$  и  $C_{VK}$  существенно отличаются?

3. Качественно определить, от каких параметров, и каким образом зависят флуктуации температуры.

### 1.2.6. Получение уравнения состояния идеального двумерного газа

Взаимодействие между частицами описывать модифицированным потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами аргона. Расчетную ячейку взять в форме квадрата со сторонами  $L = 30a$ , где  $a$  – параметр модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (равновесное расстояние между частицами). Шаг по времени взять  $0.01\tau$  (задача 1.2.2), применить периодические граничные условия. Расположить  $N$  частиц в расчетной ячейке произвольным образом, например, в квадратной решетке, или случайно разбросав по ячейке (но проследив за тем, чтобы расстояния между центрами частиц не оказались меньше  $(0.80 \div 0.85) \cdot a$ ). Задать произвольные скорости частиц, случайно распределенные по направлениям. Для этого с

помощью случайных чисел рассчитать компоненты скоростей в диапазоне  $-V_{\max} < V_{xi} < V_{\max}$ ,  $-V_{\max} < V_{yi} < V_{\max}$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Взять  $V_{\max}$  примерно равной среднеквадратичной скорости частиц двумерного газа при заданной температуре.

### Задания

1. Получить зависимость давления от температуры при различных значениях плотности  $\rho = N/L^2$ . Чем определяется интервал температур? Для получения состояния системы при заданной температуре на начальных 5000 шагах по времени производить перенормировку скоростей на каждом 10 шаге, как это описано в задаче 1.2.5. После достижения системой равновесия (за 5000 шагов) перенормировку скоростей не проводить, но произвести расчет температуры  $T$  и давления  $p$  усреднением еще примерно по 10000 шагам.

Рассмотреть 2 случая: а) определять давление по формуле  $p = \frac{dF_n}{dS}$ , где  $F_n$  – компонента силы, нормальная к поверхности  $S$ ; расчет давления может быть проведен по алгоритму, изложенному в [1], стр. 160-161; б) рассчитать давление по теореме вириала:

$$p \cdot V = NkT + \frac{1}{2} \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \right\rangle, \quad (6)$$

где  $\vec{r}_i$  – радиус-вектор  $i$ -ой частицы,  $\vec{F}_i$  – полная сила, действующая на эту частицу со стороны всех других частиц,  $V=L^2$  – объем расчетной ячейки,  $k$  – постоянная Больцмана,  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по времени. При циклическом изменении температуры за начальную конфигурацию системы при новой температуре лучше всего взять конечную конфигурацию при предыдущей температуре.

2. Построить графики полученных зависимостей  $p = f(T)$  при различных значениях плотностей  $\rho$ . Определить, при каких значениях  $\rho$  и  $T$  рассматриваемый газ частиц перестает быть идеальным.

3. Следует учитывать, что флуктуации температуры и давления даже при усреднении по большому числу шагов достаточно велики. Поэтому для получения надежных результатов нужно провести усреднение также по нескольким сериям опытов с разным набором случайных чисел и, если позволяют возможности компьютера, взять расчетную ячейку большего размера (не изменяя плотность).

### 1.2.7. Исследование простых свойств переноса системы частиц

Смоделировать систему частиц, как в задаче 1.2.6. Взять расчетную ячейку размером  $L_x = L_y = 30a$  и предусмотреть возможность изменения плотности частиц от величины, соответствующей идеальному газу, до величины, соответствующей двумерной плотноупакованной кристаллической решетке.

#### Задания

1. Привести систему в равновесное состояние примерно за 50000 шагов с определенной температурой. Получение заданной температуры можно осуществить либо перенормировкой скоростей, как в задаче 1.2.5 (канонический ансамбль частиц), либо задавая определенное подбираемое из опыта значение  $V_{max}$ , как в задаче 1.2.6. Во втором случае получаемая температура существенным образом будет зависеть также и от плотности частиц, т.е. от их средней потенциальной энергии взаимодействия.
2. Получить коэффициент самодиффузии частиц  $D_s$  при нескольких значениях температуры, используя соотношение Эйнштейна  $R^2(t) = 2dD_s t$  ( $t \rightarrow \infty$ ), где  $t$  – время,  $d$  – мерность пространства ( $d = 2$ ). Средний квадрат смещения вычисляется по формуле

$$R^2(t) = \langle |\bar{r}_i(t_2) - \bar{r}_i(t_1)|^2 \rangle, \quad (7)$$

где  $t = t_2 - t_1$ ,  $\overline{r_i}$  – радиус-вектор  $i$ -ой частицы,  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по всем частицам. Начало отсчета времени  $t_1$  – произвольно (например, начиная с 50001 шага). Время  $t_2$  можно изменять с интервалом 200-500 шагов для построения графика  $R^2$  в зависимости от  $t = t_2 - t_1$ , из которого методом наименьших квадратов следует определить  $D_S$ . Максимальное  $t_2$  – 100000 шагов. Рассмотреть интервал температур от 300 до 10 К, проходя его в цикле с шагом 10 К от большей температуры к меньшей. При этих же температурах определять кинетическую  $E_K$ , потенциальную  $E_{\Pi}$  и полную  $E$  энергии системы.

3. Построить графики зависимости  $D_S(T)$  при 3-х значениях плотностей  $\rho = N/L^2$ . Соответствует ли  $D_S(T)$  теоретической зависимости для идеального газа? Построить графики  $E_K(T)$ ,  $E_{\Pi}(T)$ ,  $E(T)$ . Как объяснить скачок на графике  $E_{\Pi}(T)$  при температуре примерно 50 К.

### 1.2.8. Исследование поведения двумерной системы частиц при охлаждении

Взаимодействие между частицами описывать модифицированным потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами аргона. Расчетную ячейку взять в форме квадрата со сторонами  $L_x = L_y = 20a$ , где  $a$  – параметр модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (равновесное расстояние между частицами). Шаг по времени взять  $0.01\tau$  (задача 1.2.2), применить периодические граничные условия.

#### Задания

1. Расположить 256 частиц в центре расчетной ячейки в квадратной решетке с периодом  $b = 1.25 \cdot a$ . Задать начальные скорости частиц (см. стр. 8).

Качественно проследить поведение системы при различных температурах, начиная от температур, соответствующих идеальному газу, до

почти нулевых (см. задачу 1.2.7). Для достижения требуемых температур проводить перенормировку скоростей, как в задаче 1.2.5.

*Замечание.* Рекомендуется в конце каждого шага по температуре записать координаты частиц (в долях  $a$ ) в текстовый файл, импортировать его в Excel или Математику и построить точечный график зависимости  $y(x)$ . Задайте маркеры в виде кружочков. Получится картина распределения атомов в расчетной ячейке.

2. Определить “температуру кристаллизации” исследуемой системы. Для этого можно построить график зависимости потенциальной энергии системы в расчете на одну частицу от температуры. Зависит ли “температура кристаллизации” от начальных условий задачи?

3. Проверить, наблюдается ли фазовый переход первого рода в системе из 361 или 400 частиц при периодических граничных условиях?

4. Исследовать зависимость числа монокристалликов, образовавшихся при охлаждении системы из 100 частиц, от начальных условий (начального расстояния между частицами, начальной скорости частиц, числа шагов, через которые проводится перенормировка скоростей). Поведение системы проследить:

а) при нескольких постоянных температурах;

б) при убывании температуры по закону  $T = T_0 \cdot \exp(-t/\tau)$ , где  $t$  – время, пропорциональное числу шагов,  $\tau$  – постоянная процесса (задаваемое число шагов, которое следует подобрать при предварительных запусках программы).

*Замечание.* При низких температурах переход системы к равновесному состоянию происходит относительно долго. Поэтому число шагов по времени для перехода к равновесию следует увеличить до 40-50 тысяч. Необходимо увеличить и число шагов между выводом кадров мультфильма.

### 1.2.9. Исследование аморфизованного состояния двумерной системы частиц с помощью функции радиального распределения

Взаимодействие между частицами описывать модифицированным потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами аргона. Расчетную ячейку взять в форме квадрата со сторонами  $L_x = L_y = L = 30a$ , где  $a$  – параметр модифицированного потенциала Леннарда-Джонса (равновесное расстояние между частицами). Расположить частицы в квадратной решетке с периодом  $a$ , полностью заполняющей расчетную ячейку. Шаг по времени взять  $0.01\tau$  (см. задачу 1.2.2).

#### Задания

1. Смоделировать аморфизованное состояние твердого тела. Для этого:
  - а) удалить случайным образом часть атомов из решетки (не более 20%), т.е. создать определенный процент вакансий;
  - б) сместить центры остальных атомов по алгоритму:

$$x_i = x_i + c \cdot (-1 + 2r_1), \quad y_i = y_i + c \cdot (-1 + 2r_2),$$

где  $r_1, r_2$  – равномерно распределенные случайные числа из интервала  $[0, 1]$ ,  $c = (0.05 \div 0.1) \cdot a$ .

2. Построить график парной корреляционной функции  $g(r)$  для атомов в расчетной ячейке – аналога функции радиального распределения. Для двумерной системы частиц

$$g(r) = k \cdot n(r) / (2\pi \cdot r \cdot \Delta r), \quad (8)$$

где  $k$  – коэффициент пропорциональности,  $n(r)$  – среднее число атомов, центры которых расположены на расстояниях от  $r$  до  $r + \Delta r$  от центра данного атома. Усреднение проводить по всем атомам, расположенным в центральной части расчетной ячейки, например, таким, что  $L/4 < x_i < 3L/4$ ,  $L/4 < y_i < 3L/4$ . (Ещё лучше усреднять по всей расчетной ячейке, но тогда нужно грамотно учесть периодические граничные условия.) В этом случае

диапазон изменения  $r$  при данном размере расчетной ячейки составит от 0 до  $7.5a$ , шаг изменения  $\Delta r$  можно взять  $0.1a$  или  $0.05a$ .

3. Исследовать поведение парной корреляционной функции при “отжиге” аморфизованных кристаллитов при 3-х различных температурах в зависимости от времени. Для этого при каждой температуре получить графики  $g(r)$  на нулевом шаге, в конце перестройки системы и примерно в середине процесса перестройки. Использовать жесткие граничные условия. Для поддержания заданной температуры применять перенормировку скоростей (как в задаче 1.2.5). Для уменьшения времени выхода системы из начального состояния задать небольшие случайно распределенные по величине и направлению скорости частиц. Чем определяется выбранный интервал температур?

### 1.2.10. Моделирование фазового перехода 1 рода в двумерной системе частиц

Предлагается рассмотреть плавление двумерного кристалла в NVT ансамбле частиц. В этом случае кристаллическая решетка соответствует плотной упаковке атомов и является треугольной с координационным числом  $z = 6$  (рис. 2). Поэтому расчетную ячейку следует взять в виде прямоугольника с размерами  $L_x = 20a$ ,  $L_y = 10\sqrt{3} \cdot a$ . В ней будет 400 атомов. Другой вариант – ячейка в виде ромба со сторонами  $20a \times 20a$ . Предусмотреть периодические граничные условия. (Можно взять и правильный шестиугольник, однако программирование периодических граничных условий усложнится). Взаимодействие между частицами описывать модифицированным потенциалом Леннарда-Джонса для аргона.

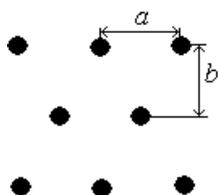


Рис. 2. Треугольная 2-х мерная решетка:  $b = \frac{\sqrt{3}a}{2}$

Для данной системы фазовый переход 1 рода – это плавление или кристаллизация, т.е. переход между состояниями "кристалл-жидкость". Определение температуры плавления  $T_{пл}$  при моделировании можно проводить разными способами. Одним из них является выявление скачка энтальпии  $H$  системы частиц при изменении температуры. Этот скачок соответствует скрытой теплоте плавления или энтальпии плавления. Как известно,  $H = U + p \cdot V$ , где  $U = E_k + E_{п}$  – внутренняя энергия, состоящая из кинетической и потенциальной энергий,  $p$  – давление,  $V$  – объем (в двумерной системе – площадь расчетной ячейки). В реальных экспериментах плавление наблюдают при постоянном давлении. Фазовый переход сопровождается скачкообразным изменением объема и плотности. Однако в нашем моделировании поддерживать постоянное давление сложно. Проще его определять при постоянном объеме.

Другой способ определения  $T_{пл}$  вытекает из того, что в твердой и жидкой фазах коэффициенты самодиффузии атомов резко отличаются. В твердой фазе атомы колеблются относительно положения равновесия, в жидкости их перемещение со временем существенно больше. Поэтому можно исследовать зависимость среднего квадрата смещения (см. зад. 1.2.7) от температуры и по излому графика  $R^2(T)$  определить  $T_{пл}$ .

Третий способ основан на исследовании упорядоченности атомов в расчетной ячейке в зависимости от температуры. В качестве характеристики упорядоченности обычно используют парную корреляционную функцию ПКФ (см. зад. 1.2.9). При переходе через  $T_{пл}$  кристалл разрушается, второй и следующие пики ПКФ резко уменьшаются, т.е. происходит потеря дальнего порядка.

Следует сделать несколько замечаний относительно процесса моделирования. В реальных условиях плавление или кристаллизация начинается, как правило, на дефектах решетки или поверхностях. Если система почти идеальная, требуется сильное переохлаждение жидкости или

перегретый кристалл. В модельном расчете с идеальным кристаллом обычно плавление начинается при существенно большей, чем реальная  $T_{пл}$  температуре при пошаговом ее увеличении. И наоборот, если пошагово уменьшать температуру жидкости, образование кристалла произойдет при температуре ниже  $T_{пл}$ . Т.е. имеет место гистерезис на графиках  $H(T)$ ,  $R^2(T)$ . Поэтому определяемая  $T_{пл}$  существенно зависит от методики моделирования.

### Задания

1. Задать координаты атомов в расчетной ячейке с треугольной решеткой. Задать температуру системы. Задать случайно распределенные по направлениям скорости частиц. Для простоты можно взять модули скоростей всех частиц одинаковыми:  $v_i = v_0$ , где  $v_0$  соответствует среднеквадратичной скорости для данной температуры: как известно,

$$\frac{mv_0^2}{2} = \frac{d}{2} \cdot kT_0, \text{ где } d = 2 - \text{мерность пространства, } m - \text{масса частицы, } k -$$

постоянная Больцмана. Компоненты скоростей можно задать так:

$$v_{xi} = v_0 \cdot \cos(2\pi r_i), \quad v_{yi} = v_0 \cdot \sin(2\pi r_i),$$

где  $r_i \in [0, 1]$  - равномерно распределенные случайные числа. При этом суммарный импульс системы будет немного отличаться от нуля. Следует занулить его, как это описано на стр. 8.

2. Смоделировать движение частиц в соответствии с алгоритмом Верле при 20 значениях температуры из диапазона 100-200 К. При каждой температуре сначала привести систему к состоянию термодинамического равновесия, производя перенормировку скоростей на каждом пятом или десятом шаге по времени. Взять шаг по времени  $\Delta t = 0.005\tau$  (см. зад. 1.2.2). Для выхода на равновесие потребуется не менее 10-20 тысяч шагов. После этого при каждой температуре в течение такого же числа шагов проводить усреднение необходимых величин, сохраняя перенормировку скоростей. Поскольку начальное состояние системы все же случайно, необходимо при каждой

температуре проводить как минимум 3 запуска программы, а потом усреднить результаты по запускам. На исследование потребуется несколько часов машинного времени.

3. При каждой температуре рассчитывать средние значения:

– кинетической энергии системы  $E_k$ ;

– потенциальной энергии  $E_{п}$ ;

– внутренней энергии  $U = E_k + E_{п}$ ;

– произведения давления на объем  $p \cdot V$ , где  $V = Lx \cdot Ly$ . Проследить, чтобы  $U$  и  $p \cdot V$  вычислялись в одних и тех же единицах (в электрон-вольтах, например).

Для расчета давления использовать алгоритмы 1а) и 1б) из задачи 1.2.6;

– энтальпии  $H = U + p \cdot V$  (здесь давление  $p$  лучше взять из 1а), т.к. значение

вириала  $\langle \sum_{i=1}^N r_i \cdot \overline{F_i} \rangle$  сильно колеблется от запуска к запуску);

– среднего квадрата смещения  $R^2$ .

4. Построить графики зависимости перечисленных выше величин от температуры:  $E_k$ ,  $E_{п}$ ,  $U$ ,  $H$  – на одном графике,  $R^2(T)$  – на другом графике. По ним определить температуру плавления.

5. Взять какие-либо температуры  $T_1 < T_{пл}$  и  $T_2 > T_{пл}$  и по окончании расчетов записать в текстовый файл координаты частиц из расчетной ячейки, выраженные в единицах  $a$ . Далее следует импортировать эти координаты, например, в Excel или Математику и построить картинку распределения частиц в плоскости  $xu$ . Можно ли по этим картинкам сказать, где частицы образуют кристалл, а где жидкость?

6. По координатам, полученным в п. 5, построить графики парной корреляционной функции для  $T_1$  и  $T_2$  (см. зад.1.2.9).

7. Рассмотреть кристалл с первоначальным распределением частиц в квадратной решетке с периодом  $a$ . Провести аналогичное моделирование в диапазоне температур от 10 до 100 К. Какому фазовому превращению

соответствует скачок  $H$  при примерно 50 К?. Построить распределение частиц в расчетной ячейке как в п. 5

### 1.2.11. Определение энергии образования вакансии в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Вуксевича

Задать координаты  $x$ ,  $y$ ,  $z$  атомов кремния в расчетной ячейке в форме шара по следующему алгоритму. В начало координат помещается атом 1 (рис. 3). Далее задаются координаты атомов 2-5 из первой координационной сферы. Как известно, у каждого из этих атомов есть ещё 3 соседа кроме атома 1. Они образуют вторую координационную сферу. Их координаты легко получить, рассмотрев элементарную кубическую ячейку со структурой алмаза (найти в литературе). На рис. 3 ось  $z$  направлена вдоль ребра кубика, ось  $y$  – по диагонали грани кубика. Аналогично следует построить еще 5-7 сферических слоев атомов.

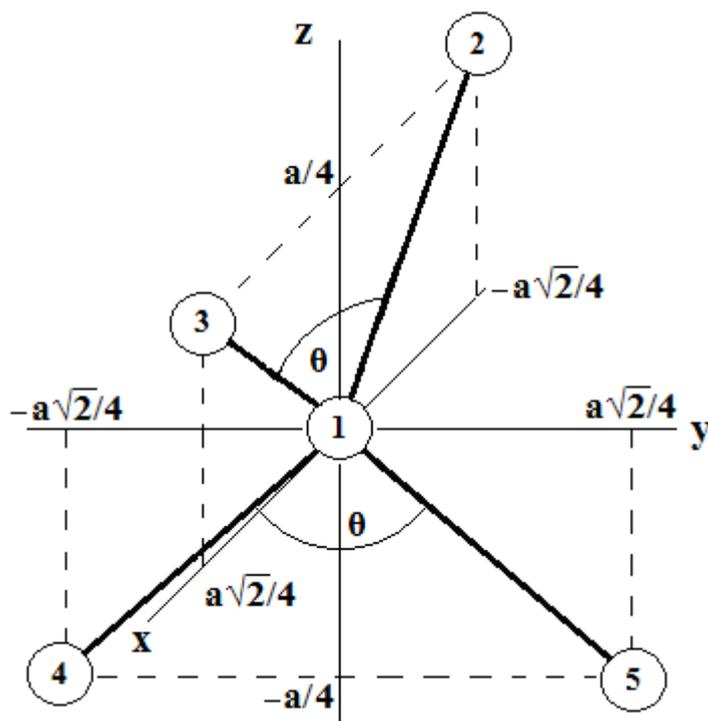


Рис. 3. Фрагмент расчетной ячейки с первыми пятью центральными атомами.  $a$  – параметр решетки кремния,  $\cos(\theta) = -1/3$

Для каждого атома сформировать массивы номеров его первых и вторых соседей, что необходимо для правильного определения потенциальной энергии атомов в расчетной ячейке. Если первый или второй сосед данного атома находится за границами расчетной ячейки, соответствующие элементы массива сделать нулевыми.

### *Задания*

1. Используя потенциал Вукевича (см. Приложение), рассчитать потенциальную энергию взаимодействия атомов идеального кристаллита, имеющих всех первых и вторых соседей (т.е. атомов из внутренней части расчетной ячейки, исключая два приграничных слоя). Если к энергии каждой связи прибавить  $H_0/2$ , то суммарная потенциальная энергия для идеального кристаллита будет равна нулю. Такой прием позволяет проверить правильность задания координат атомов в расчетной ячейке.
2. Смоделировать образование вакансии. Для этого удалить центральный атом из расчетной ячейки и изменить номера первых и вторых соседей у окружающих вакансию атомов (“завязать” новые ковалентные связи).
3. Применяя метод молекулярной динамики, осуществить релаксацию неравновесной структуры с вакансией до получения минимальной потенциальной энергии взаимодействия атомов, имеющих всех первых и вторых соседей. Для всех других атомов использовать жесткие граничные условия. Для отбора избыточной энергии из системы можно применить такой прием: если на каком-либо шаге по времени кинетическая энергия подвижных атомов начнет убывать, (т.е. кинетическая энергия перевалит через максимум), то скорости всех частиц следует уменьшить в 2-3 раза или занулить. Вычисление новых координат продолжить с предыдущего шага, но с измененными скоростями.
4. После окончания процесса релаксации определить энергию  $E_V$  образования вакансии. Если при расчетах к энергии каждой связи добавлять  $H_0/2$ , то  $E_V = E_{\Pi}$ , где  $E_{\Pi}$  – потенциальная энергии взаимодействия подвижных атомов со своими соседями после релаксации.

## 1.2.12. Определение энергии образования вакансии в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Стиллинджера-Вебера

Задать координаты атомов кремния в расчетной ячейке в виде куба, состоящего из  $N^3$  элементарных ячеек. Для этого сначала задать координаты 8 атомов из одной элементарной ячейки. Базис алмазной ячейки в долях  $a$  – параметра решетки:  $\{(0,0,0), (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2), (1/4,1/4,1/4), (3/4,3/4,1/4), (3/4,1/4,3/4), (1/4,3/4,3/4)\}$ . Далее нужно периодически размножить эти координаты по осям  $ox$ ,  $oy$ ,  $oz$ . Взять  $N = 3-5$ ; при  $N = 5$  в расчетной ячейке будет 1000 атомов. Кроме того, для ускорения последующих расчетов потенциальной энергии для каждого атома следует задать номера “близких” к нему атомов, отстоящих от данного на расстояние не более 1.5 от радиуса обрезания потенциала (обычно это 16 атомов). При расчете энергии взаимодействия данного атома со всеми другими атомами учитывать парные и трехчастичные взаимодействия только с атомами из этой группы. Применить периодические граничные условия.

### Задания

1. Рассчитать потенциальную энергию взаимодействия  $E_{nom}^0$  всех атомов идеального кристаллита.
2. Смоделировать образование вакансии, удалив центральный атом из расчетной ячейки и удалив номер данного атома из групп “близких” соседей атомов вблизи вакансии.
3. Провести релаксацию полученной неравновесной структуры так же, как в задаче 1.2.11, и рассчитать  $E_{nom}$  после релаксации. Рассчитать энергию образования вакансии по формуле:

$$E_V = E_{nom}^0 \cdot \frac{n-1}{n} - E_{nom}, \quad (9)$$

где  $n$  – число атомов в расчетной ячейке. Сравнить результат с энергией, полученной в задаче 1.2.11.

### 1.2.13. Определение энергии образования собственного междуузельного атома в кремниевом кристаллите при межатомном потенциале взаимодействия Терсоффа

Задать координаты атомов в расчетной ячейке так же, как в задаче 1.2.12. Рассчитать потенциальную энергию взаимодействия  $E_{nom}^0$  всех атомов идеального кристаллита. Вблизи центра расчетной ячейки в одно из тетраэдрических междуузлий поместить собственный атом кремния, присвоив ему номер, следующий за номером последнего атома из ячейки без дефекта. Сформировать для каждого атома массив номеров “близких” соседей (см. предыдущую задачу). Применить периодические граничные условия.

#### *Задание*

Провести релаксацию полученной неравновесной структуры так же, как в задачах 1.2.11, 1.2.12 и рассчитать  $E_{nom}$  после релаксации. Определить энергию образования собственного междуузельного атома по формуле:

$$E_{CMA} = E_{nom}^0 \cdot \frac{n+1}{n} - E_{nom}, \quad (10)$$

где  $n$  – число атомов в расчетной ячейке без дефекта.

## 2. МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО

### 2.1. Методические указания

В отличие от метода молекулярной динамики метод Монте-Карло (ММК) является недетерминистическим методом. Недетерминизм проявляется в том, что последующее состояние системы не связано с предыдущим состоянием. ММК позволяет случайным образом перебрать множество состояний системы и сделать оценку средних значений ее параметров.

Остановимся на некоторых особенностях решения предложенных ниже задач.

В задаче 2.2.1 исследуются генераторы случайных чисел. Сведения об используемом встроенном генераторе следует искать в документации по системе, в которой вы работаете (Help, учебники, техническая документация, Интернет и т.д.). Возможно, в литературе найдутся какие-то более интересные алгоритмы генерации псевдослучайных чисел. Их тоже можно рассмотреть и исследовать. Таблица распределения  $\chi^2$  имеется в любом учебнике по теории вероятности и математической статистике.

В задаче 2.2.2 рассматриваются одномерные случайные блуждания частицы с постоянным шагом. Первоначально частица помещается в точку с координатой  $x$ . При каждом Монте-Карло испытании разыгрывается равномерно распределенное случайное число  $R \in [0, 1]$ . Если  $R$  меньше заданной вероятности  $p$ , то частица делает шаг влево, иначе шаг вправо (т.е. координата  $x$  частицы изменяется на  $-1$  или на  $+1$ ). Основной характеристикой блужданий является функция  $P_N(x)$  – вероятность того, что через  $N$  шагов частица окажется в точке с координатой  $x$ . Для получения этой зависимости нужно выполнить серию из  $N_S$  блужданий (каждое из  $N$  шагов), по которой и провести усреднение. Значения  $P_N(x_i)$  удобно хранить в одномерном массиве  $P$ ,  $-N \leq i \leq N$ . Кроме определения  $P_N(x)$  параллельно

нужно подсчитывать суммы для  $x_N$  и  $x_N^2$ , чтобы получить средние значения  $\langle x_N \rangle$  и  $\langle x_N^2 \rangle$ :

$$\langle x_N \rangle = \frac{1}{N_S} \cdot \sum_{k=1}^{N_S} x_N; \quad \langle x_N^2 \rangle = \frac{1}{N_S} \cdot \sum_{k=1}^{N_S} x_N^2. \quad (11)$$

В задачах 2.2.3, 2.2.4 исследуются случайные блуждания частиц на двумерной решетке. Рассматриваемая ситуация является моделью для диффузии атомов, адсорбированных на поверхности кристалла. Отличие состоит в том, что в данной модели вероятность прыжка атома в соседнее положение не зависит от температуры, и прыжок обязательно совершается в каком-либо направлении. В реальности атомы совершают колебания в положении равновесия и лишь иногда перепрыгивают в соседние положения.

В задаче 2.2.4 время диффузии берется в числе Монте-Карло шагов (МКШ) на атом, координата  $x$  – в расстояниях между узлами, т.е. в безразмерных единицах, поэтому коэффициент диффузии имеет размерность  $[x^2/t] = \text{МКШ}^{-1}$ . При диффузии переменного числа частиц для каждой из них необходимо хранить в памяти информацию о координатах  $x, y$ . Кроме того, надо хранить информацию и о занятости узлов расчетной ячейки, например, в виде двумерного массива, состоящего из нулей и единиц. Элементарные сведения по диффузии можно найти в [9].

В задачах 2.2.5, 2.2.6 рассматривается двумерная модель движения нейтронов, совершающих прыжки случайной длины в случайных направлениях. Основная характеристика таких нейтронов – средняя длина свободного пробега. Поэтому координаты нейтронов лучше выражать в единицах этой длины.

В задачах 2.2.7 – 2.2.10 рассматривается модель Изинга в каноническом ансамбле для магнетика или бинарного сплава. Эти задачи решаются по следующему алгоритму (основу его составляет алгоритм Метрополиса).

1. Задается расчетная ячейка в виде 2-х или 3-х мерной решетки, узлы которой занимают спины или атомы. Число спинов или атомов

определенного сорта может быть переменным или постоянным, в зависимости от “динамики” изменения конфигурации системы. В классической модели Изинга с переворотом спина (задача 2.2.7) число положительных (и число отрицательных) спинов переменны и, при определенных условиях, все узлы расчетной ячейки могут быть заполнены спинами только одного знака. В задачах с динамикой Кавасаки (2.2.8 – 2.2.10) число частиц каждого сорта постоянно (состав сплава не изменяется).

При многократном изменении конфигурации системы устанавливается состояние, близкое к равновесному и зависящее только от температуры системы. Поэтому первоначальное размещение частиц не влияет на конечное состояние системы. Однако время перехода к равновесию существенно зависит от начальной конфигурации, особенно при низкой температуре или вблизи фазового перехода. Поэтому лучше всего первоначально разместить частицы случайным образом.

Обозначим начальную конфигурацию как  $X$ .

2. Генерируется новая конфигурация  $X'$ . Способ генерации – либо переворот спина, либо обмен спинов или атомов местами (динамика Кавасаки).

3. Вычисляется изменение гамильтониана системы  $\Delta H = H(X') - H(X)$ . По сути – это изменение потенциальной энергии взаимодействия частиц, ближайших к тем, которые изменили ориентацию или местоположение. В случае простых решеток (квадратной или простой кубической)  $\Delta H$  состоит всего из нескольких слагаемых.

4. Если  $\Delta H \leq 0$ , то состояние  $X'$  принимается, далее переход на п. 2.

5. Если  $\Delta H > 0$ , то состояние  $X'$  может быть принято только по вероятности. Для этого генерируется случайное равномерно распределенное число  $R \in [0, 1]$ .

6. Если  $R < \exp(-\Delta H/kT)$ , то состояние  $X'$  тоже принимается и далее переход на п. 2 (здесь  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура).

7. Если  $R > \exp(-\Delta H/kT)$ , то состояние  $X'$  не принимается, изменения в конфигурации отменяются и далее переход на п. 2.

При принятии новой конфигурации  $X'$  следует сделать изменения в приграничных слоях расчетной ячейки (если они есть) для обеспечения периодических граничных условий.

Пункты 2-7 повторяются многократно. Единицей времени служит 1 Монте-Карло шаг (МКШ) на частицу, т.е. число попыток изменения конфигурации системы, равное числу частиц в расчетной ячейке.

Прежде чем проводить суммирование искомым величин для их последующего усреднения, необходимо привести систему в равновесное состояние, соответствующее выбранному ансамблю и температуре. Для этого нужно выполнить некоторое число МКШ, заранее неизвестное, но зависящее от начальной конфигурации системы и температуры. Предварительно его следует подобрать, наблюдая за изменениями искомым величин и их флуктуацией при большом числе МКШ. По крайней мере, до усреднения нужно сделать несколько сотен, а может быть и тысяч МКШ.

При получении зависимостей энергии и намагниченности от температуры заданный интервал температур проходится с определенным шагом  $\Delta T$ . Полезно при следующей температуре за начальную конфигурацию системы брать конечную конфигурацию, полученную при предыдущей температуре.

Общее число МКШ (для перехода к равновесию и для последующего усреднения) зависит от размера расчетной ячейки, вычислительной мощности компьютера и от времени, которым вы располагаете. Поэтому его нужно выбирать в разумных пределах.

Для уменьшения времени моделирования можно до основного цикла Монте-Карло шагов создать массив значений  $W_i = \exp(-\Delta H_i / kT)$ , где  $\Delta H_i$  – ограниченный набор изменений энергии системы при изменении направления спинов или положения атомов. Для изучаемых решеток число  $i$  невелико (см. [2], стр. 234-235). В основном цикле МКШ при изменении

конфигурации определяется  $i$  и соответствующее значение  $W_i$  сравнивается со случайным числом по вышеописанному алгоритму. Тем самым исключается часто повторяемое трудоемкое вычисление экспоненты.

Рисование на экране картинок, отражающих состояние системы, нужно выполнять только в п. 1 задач 2.2.7–2.2.10. Средние значения энергии, намагниченности в зависимости от температуры лучше сохранять в отдельном файле. После завершения основного цикла МКШ эти данные следует обработать и представить графики искомых величин.

В задаче 2.2.11 рассматривается модель роста из расплава грани простого кубического кристалла – модель Коссея. В этой системе число атомов переменное, но сохраняется химпотенциал, т.е. рассматривается большой канонический ансамбль частиц. Учитываются только парные взаимодействия атомов. Рост или расплавление происходит за счет присоединения или отрыва атомов на поверхности кристалла.

Сначала следует ознакомиться с методическим пособием [15]. В программе расчетов первоначально вводятся исходные данные – размеры начального кристалла, конфигурация его поверхности, температура  $T$ , температура плавления  $T_{пл}$ , свободная энергия плавления на атом  $Q$ . До основного цикла Монте-Карло шагов рассчитываются вероятности элементарных событий – присоединения, отрыва и пустого события в зависимости от числа соседей рассматриваемого атома.

Далее организуется цикл Монте-Карло испытаний. Единицей времени является один МКШ на атом (число попыток изменить конфигурацию поверхности для  $N_x \cdot N_y$  атомов). Суммирование параметров для последующего усреднения начинается после выхода системы на некоторый “стационарный” режим роста (расплавления). Обязательно должны быть использованы периодические граничные условия на боковых гранях.

Для учета поверхностной диффузии атомов в п. 4 необходимо изменить формулы расчета вероятностей элементарных событий [5].

Размер кристалла  $N_x \cdot N_y$  и общее число МКШ следует выбирать в разумных пределах, исходя из вычислительной мощности компьютера и отведенного учебного времени.

В задаче 2.2.12 рассматривается имплантация высокоэнергетических ионов в аморфную мишень. Взаимодействие при столкновении иона и атома мишени описывается на основе модели твердых шаров. Конечное распределение вбитых ионов по глубине получается в виде гистограммы после большого числа Монте-Карло испытаний для одного иона (пока он не потеряет энергию).

Перед составлением программы расчетов следует ознакомиться с работой [16]. В ней указаны основные этапы моделирования, необходимые исходные данные, описана методика получения гистограмм.

Суммирование исследуемых величин для последующего усреднения проводится для всех оставшихся в мишени ионов. Число падающих на мишень ионов выбирается в разумных пределах.

## 2.2. Задачи

### 2.2.1. Проверка генератора случайных чисел

В большинстве систем программирования и систем вычислительной математики в качестве генератора равномерно распределенных псевдослучайных чисел применяется *линейный конгруэнтный генератор*. Он дает последовательность чисел

$$x_n = (a \cdot x_{n-1} + c) \bmod m, \quad (12)$$

где  $a$ ,  $m$ ,  $c$  – натуральные числа,  $x_0$  – заправка,  $\bmod$  – операция получения остатка от деления целого числа на целое. Этот алгоритм дает целые числа от 0 до  $m-1$ . Случайные числа в диапазоне  $[0,1]$  получаются по формуле  $x_n/m$ .

Каждый генератор случайных чисел (ГСЧ) имеет период, не превосходящий  $m$ . В общем случае период зависит от выбора  $a$ ,  $m$ ,  $c$ , причем  $m$  связано с длиной машинного слова, используемой на данном компьютере.

### Задания

1. Выяснить значения  $a$ ,  $m$ ,  $c$  для ГСЧ в используемой Вами системе программирования. Каким образом задается затравка  $x_0$ ?

Возможно, что используемый вами генератор не является линейным конгруэнтным в чистом виде.

2. Определить период этого ГСЧ с помощью одномерной модели случайных блужданий [2].

Пусть первоначально частица находится на оси  $z$  в точке с координатой  $z_0$ . При разыгрывании очередного случайного числа  $x_n$  из диапазона  $[0, 1]$   $z$  изменяется на  $-1$ , если  $x_n \leq 0.5$ , и  $z$  изменяется на  $+1$ , если  $x_n > 0.5$ . Построить график  $z = f(n)$ , где  $0 < n \leq N$ ,  $N$  – число испытаний, и из него определить период.

3. Проверить используемый вами ГСЧ на равномерность по критерию Пирсона (критерию  $\chi^2$ ). Отрезок  $[0, 1]$  разделить на  $M = 20$  “корзин” и подсчитать число случайных чисел, попадающих в каждую корзину,

например, при  $N = 1000$  или  $N = 100000$ . Определить  $\chi^2_{набл} = \sum_{i=1}^M \frac{(y_i - Y_i)^2}{Y_i}$ ,

где  $y_i$  – наблюдаемое количество чисел в  $i$ -ой корзине,  $Y_i$  – математическое ожидание для  $y_i$ ; в случае равномерно распределенных чисел должно быть

$Y_i = N/M$ . По таблице распределения  $\chi^2$  по уровню значимости  $\alpha = 0.01$  и числу степеней свободы  $k = M - 1$  определить  $\chi^2_{теорет}$ . Если

$\chi^2_{набл} < \chi^2_{теорет}$ , то данный ГСЧ выдерживает тест на равномерность с надежностью 99%.

4. Проверить используемый ГСЧ на короткие корреляции. Мерой коротких корреляций может служить автокорреляционная функция

$$C(k) = \frac{\langle x_n \cdot x_{n+k} \rangle - \langle x_n \rangle \cdot \langle x_{n+k} \rangle}{\langle x_n^2 \rangle - \langle x_n \rangle^2}, \quad (13)$$

где  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по всем возможным членам последовательности случайных чисел при данном  $k$ . Вычислить  $C(k)$  при  $k=1, 2, 3, 4$  и длине последовательности  $N=100, 1000, 10000$ . Отличие модуля  $C(k)$  от 0 более, чем на 0.1, свидетельствует о коррелированности случайных чисел.

*Замечание.* Если  $x_n$  отцентрировать, т.е. уменьшить каждое случайное число ровно на 0.5, то математическое ожидание для  $x$  будет равно нулю.

Формула будет проще:  $C(k) = \langle x_n \cdot x_{n+k} \rangle / \langle x_n^2 \rangle$ .

5. Написать функцию для генерирования случайных чисел по формуле (12), используя 4 и 8 байтов памяти для размещения  $a, m, c$  и  $x_n$ . Для такого ГСЧ выполнить пункты 2, 3, 4 при:

- а)  $a=899, c=0, m=32768$ ;
- б)  $a=65549, c=0, m=231$ ;
- в)  $a=106, c=1283, m=6075$ ;
- г)  $a=16807, c=0, m=2^{31}-1$  (только при 8 байтах).

Для случая г) сравнить затраты машинного времени на генерацию определенного числа случайных чисел (примерно  $10^5 - 10^6$ ) по приведенному алгоритму и для встроенного ГСЧ.

### 2.2.2. Одномерные случайные блуждания

Смоделировать  $N_S$  серий (каждая из  $N$  шагов) одномерных случайных блужданий частицы вдоль оси  $x$  из начального положения  $x_0 = 0$  с постоянным шагом  $h = \pm 1$  с вероятностью прыжка  $p$  вправо и  $q = 1-p$  влево.

## Задания

1. Через каждые  $\Delta N_S$  серий до достижения  $N_S$  показывать график  $x(t)$  за последние  $N$  шагов, а также график  $P_N(x)$ , полученный усреднением по всем предыдущим сериям:  $P_N(x)$  – вероятность того, что через  $N$  шагов частица окажется в точке с координатой  $x$ .  $P_N(x)$  можно получить, построив гистограмму распределения числа частиц, остановившихся после  $N$  шагов в точке с координатой  $x$ .

Взять:  $p = 0.5$ ; а)  $N = 100$ ,  $N_S = 1000$ ,  $\Delta N_S = 100$ ; б)  $N = 1000$ ,  $N_S = 10000$ ,  $\Delta N_S = 1000$ . Оценить оптимальные значения  $N_S$  и  $N$  для получения плавной и слабо флуктуирующей зависимости  $P_N(x)$ .

*Замечание.* При четном  $N$  частица останавливается в точках с четными значениями  $x$ , при нечетных  $N$  – в точках с нечетными значениями  $x$ . Чтобы исключить нулевые значения  $P_N(x)$ , можно при четных  $N_S$  брать  $x_0 = 0$ , а при нечетных  $N_S$  брать  $x_0 = 1$ .

2. Определить усреднением по всем сериям  $\langle x_N \rangle$  и  $\langle \Delta x_N^2 \rangle = \langle x_N^2 \rangle - \langle x_N \rangle^2$  в условиях п. 1. Сравнить с точными значениями  $\langle x_N \rangle_{\text{точн}} = (p-q) \cdot N \cdot |h|$  и  $\langle \Delta x_N^2 \rangle_{\text{точн}} = 4p \cdot q \cdot N \cdot h^2$ .

3. Оценить значение  $N$ , при котором распределение  $P_N(x)$  может быть аппроксимировано гауссовым распределением

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} \cdot \exp\left(-\frac{(x - \langle x_N \rangle)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (14)$$

где  $\sigma^2 = \langle \Delta x_N^2 \rangle$ . Наложить график  $N_S \cdot P(x)$  на гистограмму после всех  $N_S$  шагов.

4. Повторить пункты 1-3 для  $p = 0.6$ .

5. Определить среднее время жизни  $\tau$  частицы при наличии узлов-ловушек с координатами  $x = 0$  и  $x = a$  (здесь  $0 \leq x_0 \leq a$ ). Как только частица доходит до узла-ловушки, дальнейшие блуждания в текущей серии прекращаются. Время жизни частицы  $\tau$  – число шагов до попадания в ловушку. Исследовать

зависимость  $\tau$  от  $a$  при 3-х значениях  $x_0$  и  $\tau$  от  $x_0$  при 3-х значениях  $a$ , Поскольку отклонение частицы от  $x_0$  на несколько десятков шагов происходит лишь при достаточно большом числе шагов, следует взять  $N$  не менее 50000 при  $N_s=100$  и  $0 < a \leq 100$ .

Используя теоретическую формулу [2]  $\tau = x_0 \cdot (a - x_0) / (2D)$ , определить коэффициент самодиффузии  $D$ .

### 2.2.3. Случайные блуждания частиц на двумерной решетке

Расчетную ячейку задать в виде квадратной решетки размером  $L \times L$ . Если требуется показывать траекторию блуждающей частицы, можно взять  $L = 20$  или  $L = 30$ , иначе  $L$  следует увеличить.

*Задания*

1. Смоделировать случайные блуждания одной частицы, поместив ее первоначально в центр расчетной ячейки. Вероятность прыжков частицы в соседние положения задать равной  $1/4$ . Блуждания заканчивать при достижении заданного числа шагов  $N$ . При достижении частицей границы ячейки использовать периодические граничные условия. Показать движение частицы в виде мультфильма.

2. Провести серию из  $K$  испытаний каждое из  $N$  шагов и определить среднеквадратичное смещение частицы  $R_N = \sqrt{\langle \Delta R_N^2 \rangle}$ , где

$$\langle \Delta R_N^2 \rangle = \langle x_N^2 \rangle + \langle y_N^2 \rangle - \langle x_N \rangle^2 - \langle y_N \rangle^2; \quad (15)$$

угловые скобки означают усреднение по всем сериям,  $x_N, y_N$  – координаты

частицы после  $N$  шагов (например,  $\langle x_N^2 \rangle = \frac{\sum_{i=1}^K (x_N^2)_i}{K}$ , первоначально  $x_0 = 0$ ,

$y_0 = 0$ ). Построить график зависимости  $R_N = f(N)$ . Предполагая зависимость

$R_N = a \cdot N^\nu$ , где  $a$  – коэффициент пропорциональности, определить показатель

степени  $\nu$  методом наименьших квадратов (предварительно получив

$\ln(R_N) = \varphi(N)$ . Если получится  $\nu \approx 1/2$ , определить коэффициент самодиффузии частицы  $D_S$  из соотношения  $\langle \Delta R_N^2 \rangle = 2dD_S N$ , где  $d$  – размерность пространства (на двумерной решетке  $d = 2$ ).

3. Повторить п. 2 для треугольной решетки (см. рис. 1 на стр. 28).
4. Смоделировать случайные блуждания  $M$  частиц на квадратной решетке  $L \times L$ , взяв  $L$  не менее 30. Первоначально частицы разбросать случайным образом по узлам решетки. Случайные прыжки каждой частицы разрешить только в свободные соседние узлы. Если соседний узел занят, то частица остается на месте.

Вычислить средний квадрат полного смещения частиц  $\langle \Delta R_N^2 \rangle$  по формуле (15), считая  $\langle \dots \rangle$  усреднением по всем частицам при заданном числе шагов  $N$ . Смещение каждой частицы отсчитывать от ее начального положения. Построить график зависимости  $\langle \Delta R_N^2 \rangle = f(N)$  для нескольких концентраций частиц  $C = M/L^2$  (взять  $C = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 0.7$ ) и определить коэффициент самодиффузии при каждом значении  $C$ . Построить график  $D_S = D_S(C)$  и объяснить его.

Для получения более точного значения  $D_S$  при каждой концентрации  $C$  следует не увеличивать  $N$ , а увеличить  $L$ , или усреднить  $D_S$  по серии расчетов с различными начальными положениями частиц.

#### **2.2.4. Исследование двумерного распределения частиц при диффузии с поверхности. Метод случайных блужданий**

Рассмотрим диффузию атомов примеси в кристалл по междуузельному механизму. Пусть междуузельные положения образуют квадратную решетку. Первоначально все они не заняты, а атомы примеси находятся на границе (рис. 4). В дальнейшем каждый атом может перепрыгнуть с вероятностью  $1/4$  в соседнее междуузельное положение (если оно не занято). Граничные атомы могут прыгать только вправо, причем их место сразу после прыжка занимают

новые примесные атомы (модель неограниченного источника примеси на поверхности).

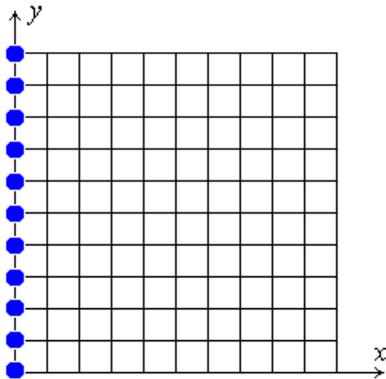


Рис. 4. Начальное положение примесных атомов при диффузии из неограниченного источника

### Задания

1. Смоделировать процесс диффузии атомов, показывая на экране их новые положения через 1 Монте-Карло шаг (в данном случае это время, за которое будут перебраны все атомы, находящиеся в расчетной области). На верхней и нижней сторонах расчетной ячейки применять периодические граничные условия. По оси  $y$  взять не менее 100 узлов решетки. Число узлов по оси  $x$  взять таким, чтобы за заданное время диффузии атомы не достигали правой границы.

2. Построить профили распределения концентрации примеси при нескольких временах диффузии, т.е. получить графики  $C = C(x, t_i)$ , например, при  $i = 1, 2, 3$ , где  $t_i$  – определенная доля от  $t_{max}$ . Естественно, что  $t_i, t_{max}$  выражаются в МКШ. Концентрация – это число атомов примеси в единице объема. В данной модели за концентрацию можно принять число (или долю) занятых примесью узлов в каждом вертикальном ряду, т.е. при  $x = \text{const}$ .

3. Сравнить полученные профили с теоретически известным распределением примеси при диффузии из неограниченного источника

$$C^*(x, t) = C_0 \cdot \text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right), \text{ где } \text{erfc}(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-v^2} dv - \text{дополнительная}$$

функция ошибок Гаусса (ее легко получить численным интегрированием),

$D$  – коэффициент диффузии,  $C_0 = \text{const}$ . Сравнивая полученные при

моделировании графики с  $C^*(x,t)$ , можно определить значения  $D$  (если вид графиков окажется похожим на  $C^*(x,t)$ ). Получается ли  $D$  независимым от  $t$ ?

4. Повторить пункты 2, 3, если примесь занимает не все поверхностные узлы, а только через 1, через 2, через 5 (первый прыжок из этих узлов разрешать только вдоль оси  $x$ ). В реальных условиях максимальная концентрация примеси вблизи поверхности всегда не более  $10^{-2}$  от концентрации узлов.

5. Рассмотреть случай диффузии из ограниченного источника, расположив первоначально атомы в 3-х вертикальных слоях посередине расчетной ячейки. Выполнить задания из пунктов 2, 3. Каковы теоретические профили  $C(x,t)$  в этом случае?

6. Смоделировать движение примесных атомов через “окно” на поверхности, занимающее ее среднюю 1/3 часть (рис. 5).

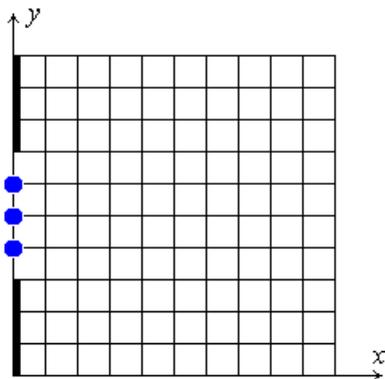


Рис. 5. Начальное положение примесных атомов при диффузии через окно в защитной маске

Построить графики зависимости концентрации  $C(x)$  при 3-х значениях  $y$  и графики  $C(y)$  при 3-х значениях  $x$ . В этом случае за концентрацию можно принять, например, число занятых узлов в квадрате  $5 \times 5$  с центром в точке с координатами  $(x,y)$ . Если есть возможность, постройте в какой-либо графической системе поверхность  $C(x,y)$ .

*Замечание.* Полезно разработать 2 варианта программы. Один – с мультипликацией с числом узлов по вертикали не более 100; другой – без мультфильма с числом узлов не менее 10000. Профили  $C(x,t_i)$  получать во втором варианте программы.

## 2.2.5. Моделирование диффузии нейтронов через пластину

Рассмотрим двумерную задачу о прохождении нейтрона через пластину толщиной  $d$  (рис. 6) [10]. В простейшей модели можно считать, что нейтрон может отразиться от пластины, поглотиться в ней или выйти с другой стороны.

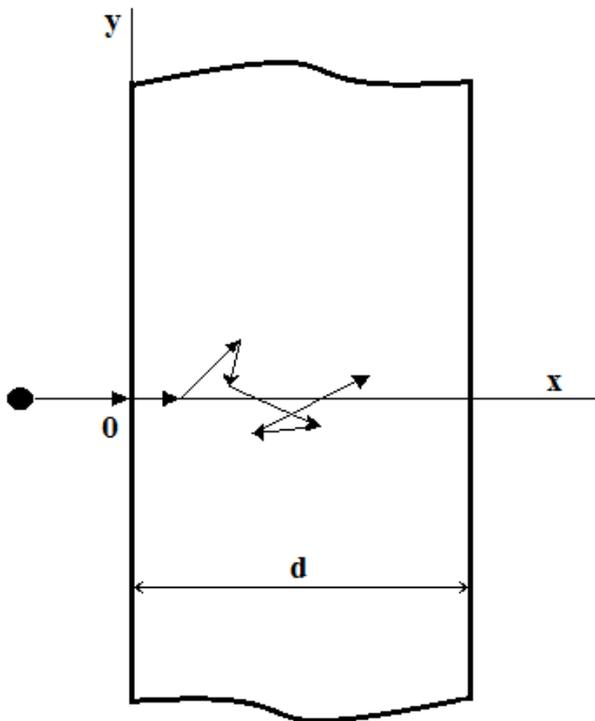


Рис. 6. Движение нейтрона через пластину

Вероятность столкновения нейтрона с ядром атома пластины (мишени) зависит от сечения рассеяния ядра  $\sigma_p$  – эффективной площади поперечного сечения, и  $n$  – концентрации ядер в мишени. Средняя длина свободного пробега нейтронов между двумя последовательными столкновениями с ядрами  $\lambda = 1/(n \sigma_p)$ .

Предположим, что  $\lambda$  есть величина постоянная. Случайная величина  $L$  – длина свободного пробега – имеет плотность распределения

$$f_\lambda(x) = (1/\lambda) \cdot \exp(-x/\lambda). \quad (16)$$

Аналогично можно рассмотреть сечение поглощения  $\sigma_{\Pi}$  ядром. Тогда вероятности рассеяния и поглощения определяются так:

$$P_p = \sigma_p / (\sigma_p + \sigma_{\Pi}), \quad P_{\Pi} = \sigma_{\Pi} / (\sigma_p + \sigma_{\Pi}). \quad (17)$$

Угол отклонения при рассеянии – тоже случайная величина. В грубом приближении для тяжелых ядер мишени рассеяние можно считать симметричным по кругу, т.е. отклонения на углы в диапазоне  $[0, 2\pi]$  равновероятны. Поэтому расчет координат нейтрона при следующем столкновении проводится по формулам

$$x = x + L \cdot \cos(\theta), \quad y = y + L \cdot \sin(\theta), \quad (18)$$

где  $L$  – случайная длина свободного пробега,  $\theta = 2\pi \cdot r$  случайный угол рассеяния,  $r$  – равномерно распределенное в интервале  $[0, 1]$  случайное число.

Интегральная функция распределения для  $L$ :

$$W_{\lambda}(x) = \int_0^x f_{\lambda}(z) dz. \quad (19)$$

Доказывается [10], что при таком законе распределения случайная длина свободного пробега может быть вычислена по формуле  $L = -\lambda \cdot \ln(r)$ , где  $r$  – равномерно распределенное случайное число из интервала  $[0, 1]$ .

Таким образом, исходными данными для задачи являются  $\lambda$ ,  $d$ ,  $P_p$ ,  $P_{п}$ . Причем толщину пластинки  $d$  можно задавать в относительных единицах  $d/\lambda$ .

### *Задания*

1. Показать в виде мультфильма движение одного нейтрона через пластинку.

Движение заканчивается, если:

- а) нейтрон вылетит назад (отразится);
- б) нейтрон поглотится внутри пластинки;
- в) нейтрон пройдет через пластинку (т.е. будет  $x > d$ ).

Принять, что первое вхождение в пластинку будет всегда по оси  $x$ .

Рассмотреть диапазоны изменения параметров задачи:

$$0.1 < d/\lambda < 10, \quad 0.7 < P_p < 0.99.$$

Показывать траекторию нейтрона.

2. Смоделировать серию из  $N$  попыток прохождения нейтрона через пластинку, приняв  $N$  не менее 10000. Подсчитывать долю отраженных, поглощенных и прошедших нейтронов, т.е. коэффициенты отражения,

поглощения и пропускания. Построить графики зависимостей этих долей от  $d/\lambda$  при 2-х значениях  $P_p$  и от  $P_p$  при 2-х значениях  $d/\lambda$ . Можно ли аппроксимировать коэффициент пропускания спадающей экспонентой  $K_{пр} = \exp(-d/\mu)$ ? Если да, то определить коэффициент поглощения  $\mu$ .

### 2.2.6. Двумерный ядерный реактор

Рассмотрим двумерный однородный урано-графитовый ядерный реактор в виде круга радиусом  $R$  (рис. 7) [9].

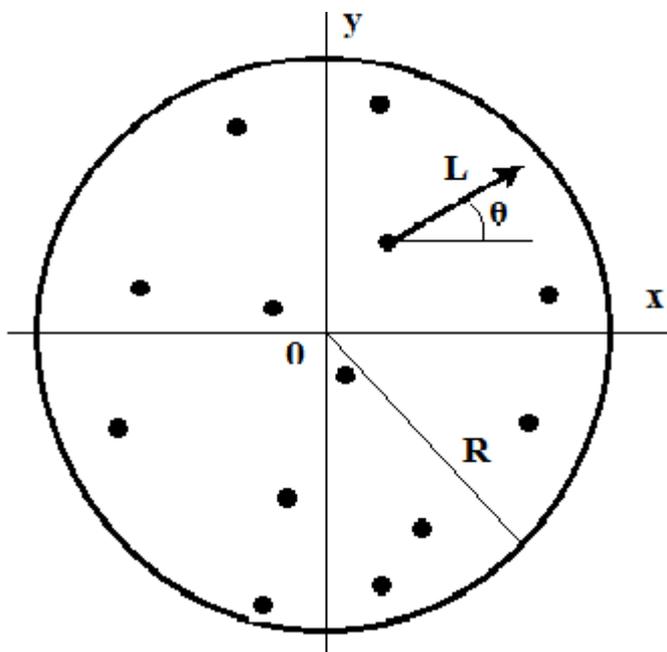


Рис. 7. Двумерный ядерный реактор. Точками показаны нейтроны

Первоначально в нем находятся в случайных положениях  $N_0$  точечных нейтронов. Средняя длина свободного пробега нейтрона до взаимодействия с ядром (см. задачу 2.2.5) равна  $\lambda$ . При взаимодействии с ядром возможны следующие события: а) изотропное, (т.е. равновероятное по всем направлениям) рассеяние нейтрона с вероятностью  $P_{рас}$ ; б) поглощение нейтрона без деления ядра с вероятностью  $P_{ногл}$ ; в) поглощение нейтрона с делением ядра с вероятностью  $P_{дел} = 1 - P_{рас} - P_{ногл}$ . При этом ядро испускает в среднем  $n = 2$  нейтрона.

Смоделировать поведение нейтронов со временем, разыгрывая для каждого нейтрона случайную длину свободного пробега  $L$ , случайный угол рассеяния  $\theta$  в диапазоне  $[0, 2\pi]$ . Считать, что стенки реактора свободно пропускают нейтроны. Возникающие при делении ядра нейтроны имеют координаты места реакции и случайные направления скоростей.

### *Задания*

1. Показывать в виде мультфильма движение нейтронов за несколько первых Монте-Карло шагов (МКШ) (первый МКШ – перебор  $N_0$  нейтронов, второй МКШ перебор всех нейтронов, оставшихся в реакторе после первого МКШ, и т.д.). Чтобы кадры мультфильма не менялись слишком быстро, сделайте задержку при рисовании. Принять  $N_0 = 50$ ,  $R/\lambda = 100$ ,  $P_{ногл} = 0.015$ ,  $P_{дел} = 0.022$ .

2. Исследовать зависимость числа нейтронов в реакторе от числа МКШ (без мультипликации). Построить графики этой зависимости при нескольких запусках программы с разными затравками для генератора случайных чисел. Следует заметить, что при таком малом значении  $N_0$  разброс результатов будет весьма существенным. Поэтому нужно сделать не менее 10 запусков программы.

Найти условия затухания реактора или взрыва реактора. Считать, что реактор взрывается, если число нейтронов достигает  $100 N_0$ . Варьировать  $R/\lambda$  в диапазоне  $[20, 200]$  и в небольших пределах  $P_{ногл}$  и  $P_{дел}$ . Оценить критический размер реактора  $R_{крит}/\lambda$ , при котором происходит экспоненциальный рост числа нейтронов, т.е. начинается цепная реакция.

3. В реальном трехмерном реакторе среднее число рождающихся при делении ядра нейтронов  $n = 2.47$ . В нашей модели, чтобы получить близкое к этому значению число нейтронов, можно на нечетном МКШ брать  $n = 2$ , а на четном шаге брать  $n = 3$ . Повторить исследования п. 2 при таком изменении алгоритма. Как изменится при этом критический радиус реактора?

### Замечания

1. Информацию о координатах изменяющегося числа нейтронов можно хранить в памяти компьютера разными способами. Наиболее просто завести статические массивы координат  $X$  и  $Y$  достаточно большого размера (50000-100000) и массив  $T$  типов нейтрона из единиц и нулей (1 – нейтрон в реакторе, 0 – нейтрон вне реактора). Первоначально задаются типы  $T(i) = 1$  и координаты  $N_0$  нейтронов, например, так:

$$X(i)=R \cdot r_1(i) \cdot \cos(2\pi \cdot r_2(i)), \quad Y(i)=R \cdot r_1(i) \cdot \sin(2\pi \cdot r_2(i)), \quad i = 1 \dots N_0, \quad (20)$$

где  $r_1(i)$ ,  $r_2(i)$  – случайные равномерно распределенное в диапазоне  $[0, 1]$  числа. При следующих МКШ при вылете нейтрона из реактора  $T(i)$  обнуляется. При рождении новых нейтронов подсчитывается их число, и запоминаются их координаты в дополнительных массивах за текущий МКШ, и по его окончании в массивы  $X$ ,  $Y$ ,  $T$  дописывается вместо нулей информация о новых нейтронах. Окончательное число нейтронов – число единиц в массиве  $T$ .

2. На очередном МКШ перебираются все нейтроны, для которых  $T(i) = 1$ . Для каждого из них рассчитывается случайная длина свободного пробега по формуле  $L = -\lambda \cdot \ln(r_1)$  и определяются координаты столкновения с ядром урана:

$$x = x + L \cdot \cos(2\pi \cdot r_2), \quad y = y + L \cdot \sin(2\pi \cdot r_2), \quad (21)$$

где  $r_1, r_2$  – равномерно распределенные случайные числа из интервала  $[0, 1]$ . Далее при условии не вылета нейтрона из реактора определяется вид события: если случайное число  $r_3 < P_{\text{погл}}$ , то происходит поглощение; если  $P_{\text{погл}} < r_3 < P_{\text{погл}} + P_{\text{дел}}$ , то происходит деление; при  $r_3 > P_{\text{погл}} + P_{\text{дел}}$  происходит рассеяние.

Максимальное число МКШ подбирается так, чтобы массивы  $X$ ,  $Y$ ,  $T$  не переполнялись.

### 2.2.7. Модель Изинга на квадратной решетке для ферромагнетика с переворотом спина в каноническом ансамбле

Расчетную ячейку задать в виде квадрата размером  $(N+2)^2$ . Узлы квадратной решетки обозначить индексами  $i, j$  ( $i = 0, 1, \dots, N+1, j = 0, 1, \dots, N+1$ . Ряды с  $i, j = 0$  и  $i, j = N+1$  необходимы для применения периодических граничных условий.) В узлы решетки  $i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, N$  случайным образом поместить спины со значениями  $+1$  или  $-1$ , хранящимися в двумерном массиве  $S$ . Первоначально число положительных и число отрицательных спинов могут быть равными, либо могут быть взяты только положительные или только отрицательные спины.

Периодические граничные условия предполагают, что

$$S_{N+1,j} = S_{1j}, \quad S_{i,N+1} = S_{i,1}, \quad S_{0j} = S_{Nj}, \quad S_{i0} = S_{i,N} . \quad (22)$$

*Задания*

1. Получить несколько картинок распределения спинов после достаточно большого числа МКШ при  $N = 20, 100, 500$  при  $T = 0.4 T_C, T = T_C, T = 1.5 T_C$ , где  $T_C$  – критическая температура фазового перехода 2-го рода. Оцените, при каком  $N$  вычислительная мощность вашего компьютера обеспечит получение результатов за приемлемое в учебном процессе время?

2. При заданном  $N$  получить зависимость средней намагниченности

$$\langle M \rangle = \left\langle \left| \frac{n_+ - n_-}{N^2} \right| \right\rangle \quad \text{и средней энергии системы} \quad \langle E \rangle = \left\langle -J \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \right\rangle$$

от температуры  $T$ . Здесь  $n_+, n_-$  – число положительных и число отрицательных спинов в области  $i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, N$ ,  $J$  – энергия взаимодействия двух соседних спинов (для ферромагнетика  $J > 0$ ). Сумма берется по всем парам спинов, являющихся ближайшими соседями. Ее можно подсчитать, например, так:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j = \sum_{j=1}^N \left( \sum_{i=1}^N S_{ij} \cdot (S_{i-1,j} + S_{i,j-1}) \right). \quad (23)$$

В этом случае энергия каждого спин-спинового взаимодействия вычисляется только один раз.

Намагниченность получается в безразмерных единицах, энергия – в единицах  $J$ , температура задается в единицах  $J/k$ , где  $k$  – постоянная Больцмана. При усреднении намагниченность следует брать по модулю, т.к. при одной и той же температуре могут получаться как положительные, так и отрицательные значения  $M$ . Усреднение  $\langle \dots \rangle$  проводить по достаточно большому числу МКШ после достижения равновесного для данной температуры состояния.

Построить графики средней намагниченности на спин  $m(T) = \frac{\langle M \rangle}{N^2}$  и средней энергии на спин  $\varepsilon(T) = \frac{\langle E \rangle}{N^2}$  при  $0.3T_C < T < 1.5 T_C$  не менее чем по 20 значениям  $T$ .

3. Получить зависимости от температуры теплоемкости на спин  $C(T)$  и магнитной восприимчивости на спин  $\chi(T)$ .  $C(T) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial T}$  можно получить численным дифференцированием зависимости  $\varepsilon(T)$ . С другой стороны, можно использовать средние значения, полученные после перехода системы в равновесное состояние:

$$C = \frac{1}{N^2} \cdot \frac{1}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2); \quad \chi = \frac{1}{N^2} \cdot \frac{1}{kT} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (24)$$

Теплоемкость получается в единицах  $k$ , восприимчивость – в единицах  $J^{-1}$ .

По графикам  $C(T)$  и  $\chi(T)$  определить температуру фазового перехода и сравнить ее с теоретически полученным значением

$$T_C = \frac{J}{k} \cdot \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.269 \cdot \frac{J}{k}. \quad (25)$$

4. Выполнить пункты 1-3 для антиферромагнетика ( $J < 0$ ). Объяснить поведение  $m(T)$  в этом случае. Если вычислять, так называемую, клеточную намагниченность и клеточную восприимчивость (см. [2], стр. 256), то фазовый переход можно определить и по ним.

## 2.2.8. Модель Изинга для магнетика на квадратной решетке с динамикой Кавасаки

Использовать условия задачи 2.2.7. Задать равное число положительных и отрицательных спинов. Изменение конфигурации системы от  $X$  к  $X'$  в алгоритме Метрополиса производить не переворотом спина, а путем обмена местами двух соседних спинов, если они окажутся противоположного знака. При этом сохраняется число положительных и число отрицательных спинов. Выбор пары спинов для попытки обмена может быть случайным, но можно применить и последовательный перебор. В первом варианте случайно выбирается спин, затем случайно выбирается один из его четырех соседей. Если он окажется того же знака, вновь случайно выбирается спин и т.д. Применить периодические граничные условия. Если один или оба спина оказываются в приграничной области ( $i, j = 1$  или  $N$ ), предусмотреть изменение  $S_{ij}$  в граничных слоях ( $i, j = 0$  или  $N+1$ ).

### Задания

1. Выполнить пункты 1, 2, 3 задачи 2.2.7 (намагниченность  $M$  и магнитную восприимчивость  $\chi$  не определять). Рассмотреть случаи ферромагнетика ( $J > 0$ ) и антиферромагнетика ( $J < 0$ ) и сравнить полученные для них критические температуры.
2. Рассмотреть случай обмена местами двух не соседних спинов противоположного знака. Объяснить различие в зависимости  $\varepsilon(T)$  по сравнению с п. 1 при низких температурах.

*Замечание.* Алгоритм выбора спинов для попытки обмена может быть таким:

- а) получить 4 равномерно распределенных случайных числа  $i1, j1, i2, j2$  ( $1 \leq i, j \leq N$ );
- б) если  $S_{i1, j1} \neq S_{i2, j2}$ , то производить попытку обмена;
- в) иначе получить два новых числа  $i2, j2$  и повторить пункт б).

Есть ли различие в результатах моделирования при обмене соседних и не соседних спинов?

3. Определить температуру фазового перехода при доле положительных спинов  $x = 0.4$ :  $x = 0.6$ .

### 2.2.9. Модель Изинга для бинарного сплава на квадратной решетке в каноническом ансамбле

Расчетную ячейку задать так же, как и в задаче 2.2.7. Рассмотреть бинарный сплав состава  $AB$ . В массиве  $S$  атому сорта  $A$  сопоставить значение 1, атому сорта  $B$  – значение  $-1$ . Использовать периодические граничные условия. Для попытки изменения конфигурации системы применить алгоритм, описанный в замечании к предыдущей задаче.

Энергия системы взаимодействующих атомов (без учета постоянной составляющей) может быть записана в виде [2]

$$E = -\frac{E_{см}}{2} \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j, \quad (26)$$

где суммирование осуществляется по всем парам только соседних атомов,  $E_{см}$  – энергия смешения сплава  $AB$ :  $E_{см} = E_{AB} - \frac{E_{AA} + E_{BB}}{2}$ , где  $E_{pq}$  – энергия взаимодействия атома сорта  $p$  с атомом сорта  $q$  ( $p, q = A, B$ ). Величина  $E_{см}/2$  для бинарного сплава аналогична энергии обменного взаимодействия спинов  $J$  в модели Изинга для магнетиков.

*Задания*

1. Получить несколько картинок распределения атомов при условиях п.1 задачи 2.2.7. Рассмотреть случаи распадного твердого раствора ( $E_{см} > 0$ ) и упорядоченного твердого раствора ( $E_{см} < 0$ ).

2. Получить зависимость средней энергии на атом от температуры

$\varepsilon(T) = \frac{\langle E \rangle}{N^2}$  при  $0.3T_C < T < 1.5 T_C$  не менее чем по 20 значениям  $T$ , где  $T$  –

температура системы, измеряемая в единицах  $E_{cm} / 2k$ ,  $T_C$  – критическая температура,  $\langle E \rangle$  – среднее значение энергии, определяемой по формуле (26) после достижения системой равновесного состояния. Вблизи фазового перехода  $\langle E \rangle$  может быть еще раз усреднено по значениям, полученным при изменении температуры от  $T_{min}$  к  $T_{max}$  и от  $T_{max}$  к  $T_{min}$ .

3. Построить график  $\varepsilon(T)$ . Провести сглаживание этой зависимости, например, методом скользящего среднего (найти в Интернете) с длиной окна усреднения в 3 или 5 значения. Найти зависимость удельной теплоемкости

$C(T) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial T}$  от температуры, применив трехточечное численное дифференцирование сглаженных значений, построить график  $C(T)$ . По нему определить температуру фазового перехода ”порядок-беспорядок” и сравнить ее с теоретическим значением, полученным по формуле (25).

### 2.2.10. Модель Изинга для бинарного сплава с ПК решеткой в каноническом ансамбле

Расчетную ячейку задать в виде куба размером  $(N+2)^3$ . Узлы простой кубической решетки обозначить индексами  $i, j, k$  ( $0 \leq i, j, k \leq N+1$ ; плоскости  $i, j, k = 0, i, j, k = N+1$  необходимы для применения периодических граничных условий). Рассмотреть бинарный сплав  $AB$  состава  $x = 0.5$ . В узлы решетки  $1 \leq i, j, k \leq N$  случайным образом поместить равное количество атомов сорта  $A$  и сорта  $B$ , обозначив их 1 (для  $A$ ) и  $-1$  (для  $B$ ). Значения 1 и  $-1$  удобно хранить в трехмерном массиве  $S$ . Использовать периодические граничные условия (см. задачи 2.2.7, 2.2.9).

*Замечание.* Энергия взаимодействия системы атомов может быть записана в виде

$$E = \frac{-E_{cm}}{2} \cdot \left( \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N C_{ijk} (C_{i-1,j,k} + C_{i+1,j,k} + C_{i,j-1,k} + C_{i,j+1,k} + C_{i,j,k-1} + C_{i,j,k+1}) \right), \quad (27)$$

где  $E_{см}$  – энергия смещения (см. предыдущую задачу). Множитель  $1/2$  перед суммами появляется потому, что при таком суммировании энергия взаимодействия каждой пары атомов входит в суммы 2 раза).

### *Задание*

Выполнить пункты 1-3 задачи 2.2.9. В пункте 1 на экран следует выводить 1 или 2-3 сечения расчетного куба плоскостями, проходящими через центр куба.

Теоретически модель Изинга для 3-х мерных решеток не решается, но численно значения критической температуры для различных решеток определены с хорошей точностью. В частности, для ПК решетки она составляет величину  $T_C = 2.2554 E_{см}/k$ .

## **2.2.11. Моделирование роста грани простого кубического кристалла**

Исходный кристалл, состоящий из атомов-кубиков, задать в виде двумерного массива  $H$ , где  $H_{ij}$  – высота столбика атомов в позиции  $i, j$  ( $1 \leq i \leq N_x$ ,  $1 \leq j \leq N_y$ ). Использовать периодические граничные условия на боковых гранях. Подробнее смотрите [15].

### *Задания*

1. Качественно исследовать изменение морфологии поверхности кристалла по мере роста или расплавления в зависимости от температуры  $T$ , свободной энергии плавления  $Q$ , начальной конфигурации поверхности (плоская, ступенчатая, пирамидообразная и т.д.). Показывать изменение вида поверхности через определенное число Монте-Карло шагов (число попыток изменения  $H_{ij}$  в расчете на один атом поверхности). В качестве примера можно взять значения  $T_{пл} = 1688$  К,  $Q = 0.52$  эВ/атом для кремния и  $T_{пл} = 1356$  К,  $Q = 0.11$  эВ/атом для меди (хотя Si и Cu имеют не простую кубическую решетку).

2. Исследовать зависимость относительной скорости роста кристалла от температуры (при росте и при расплавлении) в интервале  $0.5 T_{пл} < T < 1.5 T_{пл}$  при нескольких значениях  $Q$  и при различных конфигурациях исходной поверхности.
3. Исследовать зависимость шероховатости поверхности (среднеквадратичного отклонения для  $H_{ij}$ ) от температуры при нескольких значениях  $Q$  и при плоской исходной поверхности.
4. Изменить модель роста так, чтобы кроме событий пустого, присоединения и отрыва в позиции  $i, j$  рассматривать и возможность диффузионного прыжка атома в одном из четырех соседних направлений, если это геометрически возможно.

### 2.2.12. Моделирование ионной имплантации

Материал мишени, в котором двигаются внедряемые ионы, считать аморфным. Положение иона характеризовать единственной координатой  $z$ . В качестве мишени рассмотреть кремний ( $E_d = 25$  эВ,  $M_M = 28$  а.е.м.,  $Z_M = 14$ ). Подробнее смотрите [16].

#### Задания

1. Исследовать зависимость доли внедренных (или отраженных) ионов от энергии  $E$  иона и его атомного номера  $Z_I$ . Диапазон изменения энергии – от 0 до 200 кэВ; рассмотреть ионы В, Р, As, Ge, Sb.
2. Получить гистограммы распределения по глубине при нескольких энергиях одного-двух вышеуказанных ионов (по выбору преподавателя). Определить среднепроецированный пробег  $R_p$ , среднеквадратичное отклонение  $\Delta R_p$  и сравнить с табличными значениями. Объяснить различия.
3. Получить зависимости  $R_p$  от  $E$  для легких ионов (например, В) и для тяжелых ионов (например, Sb). Объяснить их.

1. Потенциал Леннарда-Джонса:

$$U(r) = D \cdot \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \cdot \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right],$$

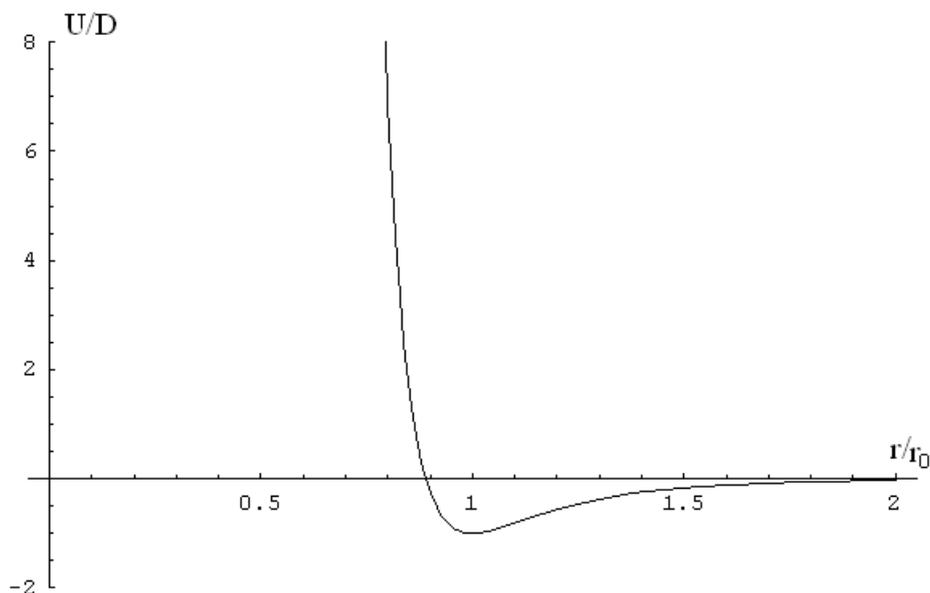
где  $r$  – расстояние между центрами взаимодействующих атомов,  $r_0$  – равновесное расстояние между центрами атомов,  $D$  – модуль потенциальной энергии взаимодействия между атомами при равновесии. Для атомов аргона  $D = 0.0103$  эВ,  $r_0 = 0.382$  нм.

В [1] этот потенциал приводится в форме

$$U(r) = 4D \cdot \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

где  $\sigma = r_0 / \sqrt[6]{2}$  – расстояние между центрами атомов, при котором  $U(\sigma) = 0$ .

График  $U(r)$  имеет вид:



2. Модифицированный потенциал Леннарда-Джонса:

$$U(r) = 4D \cdot \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \cdot K(r),$$

$$\text{где } K(r) = \begin{cases} 1, & \text{при } r < r_1, \\ \left[1 - \left(\frac{r - r_1}{r_1 - r_2}\right)^2\right]^2, & \text{при } r_1 \leq r \leq r_2, \\ 0, & \text{при } r > r_2, \end{cases}$$

где  $r_1 = (1.1 \div 1.2) \cdot r_0$ , радиус обрезания  $r_2 = (1.7 \div 1.8) \cdot r_0$ .

### 3. Потенциал Вуксевича [11].

В ковалентных кристаллах кремния, германия, алмаза потенциальная энергия, приходящаяся на каждую из 4-х связей атома, имеет вид:

$$E_i = \frac{H_0}{2(b-d)} \cdot \left[ -b \cdot \exp\left(\frac{r_0 - r_i}{b}\right) + d \cdot \exp\left(\frac{r_0 - r_i}{d}\right) \right] \cdot \frac{1}{6} \cdot \sum_{j=1}^6 \exp\left[-\frac{(\cos^2 \theta_{ij} - \cos^2 \theta_{ij}^0)^2}{c}\right],$$

где  $i = 1, 2, 3, 4$ ;  $H_0$  – энергия сцепления атома с решеткой;  $b, c, d$  – константы потенциала;  $r_0, r_i$  – равновесная и конкретная длина  $i$ -ой связи ( $r_0 = a\sqrt{3}/4$ , где  $a$  – параметр решетки);  $\theta_{ij}^0, \theta_{ij}$  – равновесный и конкретный угол между связями ( $\cos \theta_{ij}^0 = -1/3$ ).

Параметры потенциала Вуксевича.

	$H_0$ , эВ	$a$ , нм	$b$ , нм	$d$ , нм	$c$
Si	4.67	0.543	0.0956	0.0239	0.192
Ge	3.84	0.564	0.0968	0.0242	0.175

### 4. Потенциал Стиллинджера-Вебера [12].

Потенциальная энергия взаимодействия  $N$  атомов имеет вид:

$$U = \sum_{i < j}^N U_2(\bar{r}_i, \bar{r}_j) + \sum_{i < j < k}^N U_3(\bar{r}_i, \bar{r}_j, \bar{r}_k),$$

где  $i < j, i < j < k$  означает суммирование по возможным различным парам и тройкам атомов,  $\bar{r}_i$  – радиус-вектор  $i$ -го атома. Первое слагаемое описывает

двухчастичное взаимодействие, второе слагаемое – трехчастичное взаимодействие.

$$U_2(\bar{r}_i, \bar{r}_j) = \varepsilon \cdot f_2\left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right), \text{ где } f_2\left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right) = \begin{cases} A \cdot [B \cdot \left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right)^{-p} - \left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right)^{-q}] \cdot e^{\frac{\sigma}{r_{ij}-r_1}}, & r_{ij} < r_1 \\ 0, & r_{ij} \geq r_1 \end{cases}$$

$$U_3(\bar{r}_i, \bar{r}_j, \bar{r}_k) = \varepsilon \cdot f_3\left(\frac{r_i}{\sigma}, \frac{r_j}{\sigma}, \frac{r_k}{\sigma}\right), \text{ где}$$

$$f_3\left(\frac{r_i}{\sigma}, \frac{r_j}{\sigma}, \frac{r_k}{\sigma}\right) = h\left(\frac{r_{ij}}{\sigma}, \frac{r_{ik}}{\sigma}, \vartheta_{jik}\right) + h\left(\frac{r_{ji}}{\sigma}, \frac{r_{jk}}{\sigma}, \vartheta_{ijk}\right) + h\left(\frac{r_{ki}}{\sigma}, \frac{r_{kj}}{\sigma}, \vartheta_{ikj}\right),$$

$r_{ij}$  – расстояние между центрами  $i$ -го и  $j$ -го атомов,

$\vartheta_{jik}$  – угол между  $\bar{r}_{ij}$  и  $\bar{r}_{ik}$ ,

$$h\left(\frac{r_{ij}}{\sigma}, \frac{r_{ik}}{\sigma}, \vartheta_{jik}\right) = \lambda \cdot \exp\left[\frac{\gamma \cdot \sigma}{r_{ij} - r_1} + \frac{\gamma \cdot \sigma}{r_{ik} - r_1}\right] \cdot \left(\cos \vartheta_{jik} + \frac{1}{3}\right)^2 \text{ при } r_{ij} < r_1, r_{ik} < r_1,$$

и  $h = 0$  в противном случае.

Константы потенциала  $\varepsilon, \sigma, r_1, \lambda, \gamma, A, B, p, q$  для кремния имеют следующие значения:

$\varepsilon$ , эВ/пару атомов	$\sigma$ , нм	$r_1$	$\lambda$	$\gamma$	A	B	p	q
2.17	0.2095	1.8 $\sigma$	21.0	1.20	7.05	0.602	4	0

$\sigma = r_0 / \sqrt[6]{2}$  – так же, как в потенциале Леннарда-Джонса;  $r_0 = a\sqrt{3}/4$ , где  $a$  – параметр решетки.

#### 4. Потенциал Терсоффа [13].

Потенциальная энергия взаимодействия системы из  $N$  атомов

$$U = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij},$$

где  $V_{ij}$  – энергия взаимодействия атомов  $i$  и  $j$ .

$$V_{ij} = f_C(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})],$$

где  $f_C$  – функция обрезания,  $f_R$  – потенциал отталкивания,  $f_A$  – потенциал притяжения,  $r_{ij}$  – расстояние между центрами  $i$ -го и  $j$ -го атомов:

$$f_R(r_{ij}) = A \exp(-\lambda \cdot r_{ij}), \quad f_A(r_{ij}) = -B \exp(-\mu \cdot r_{ij}),$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left[ \cos(\pi(r_{ij} - R)/(S - R)) \right], & R < r_{ij} < S \\ 0, & r_{ij} > S \end{cases}$$

Коэффициент  $b_{ij}$  учитывает взаимодействие троек атомов в окружении атомов с номерами  $i, j$ :

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{-\frac{1}{2n}},$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_C(r_{ik}) g(\theta_{jik}),$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta_{ijk})^2},$$

где  $\theta_{ijk}$  - угол между связями  $i, j$  и  $i, k$ .

Константы потенциала для кремния и германия представлены в следующей таблице.

Параметр	Si	Ge
A, эВ	1830.8	1769
B, эВ	471.18	419.23
$\lambda$ , нм <sup>-1</sup>	24.799	24.451
$\mu$ , нм <sup>-1</sup>	17.322	17.047
$\beta$	$1.1 \cdot 10^{-6}$	$9.01 \cdot 10^{-7}$
n	0.78734	0.75627
c	$1.0039 \cdot 10^5$	$1.0643 \cdot 10^5$
d	16.217	15.65
h	-0.59825	-0.43884
R, нм	0.27	0.28
S, нм	0.30	0.31

## Литература

1. Гулд Х, Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 1. – М.: Мир, 1990.
2. Гулд Х, Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 2. – М.: Мир, 1990.
3. Хеерман Д. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990.
5. Моделирование роста и легирования полупроводниковых пленок методом Монте-Карло / Л.Н. Александров, Р.Б.Бочкова, А.Н. Коган, Н.П. Тихонова; под ред. С.И. Стенина. – Новосибирск: Наука, 1991.
6. Жданов Э.Р., Маликов Р.Ф., Хисматтулин Р.К. Компьютерное моделирование физических явлений и процессов методом Монте-Карло. – Уфа: Изд-во БГПУ, 2005. –124 с.
7. Агафонов А.Н., Еремин А.В. Метод классической молекулярной динамики в моделировании физико-химических процессов. – Самара: СамГУ, 2017. – 68 с.
8. Селезнев А.А. Основы метода молекулярной динамики. –Саров: Сар.ФТИ, 2017. – 72 с.
- 9 Моделирование физических явлений на ЭВМ. Часть.5. Статистическое моделирование / Кайфан Д.А., Кандауров Н.В., Краснов А.А., Мезенцев Н.А., Мешков О.И., Пиндюрин В.Ф., Скирбо Б.А. – Новосибирск: НГУ. 2000. – 83 с.
10. Метод Монте-Карло на графических процессорах / Некрасов К.А., Поташников С.И., Боярченков А.С., Купряжкин А.Я. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та., 2016. – 60 с.
11. Vuksevich M.R. On elastic properties of covalent crystals. Phys. Stat. Sol. 1970, V. 40, № 1, p. 193 –205.
12. Stillinger F.H., Veber T.A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. Phys. Rev. B. 1985, V. 31, № 8, p. 5262–5271.

13. Tersoff J Modeling solid - state chemistry: Interatomic potential for multicomponent sistem. Phys. Rev. B. 1989, V. 39, № 8, p. 5566–5568.
14. Павлов П.В. , Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. – Н.Новгород: Изд-во ННГУ, 1998.
15. Васин А.С. Моделирование роста грани простого кубического кристалла. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2014.
16. Моделирование ионной имплантации в кремниевой технологии. Описание лабораторной работы. Сост. Васин А.С., Акинкина Е.И. – Н.Новгород: Изд-во ННГУ, 1995.

Александр Сергеевич **Васин**

## **КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ В ФИЗИКЕ**

**Практикум**

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Национальный исследовательский  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»  
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.