Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Санкт – Петербургский государственный политехнический университет»

Институт прикладной математики и механики

Кафедра теоретической механики

**Отчет**

Дисциплина: Компьютерные технологии

На тему: «Молекулярная динамика»

Выполнила:

студентка ИПММ 5 курса,

кафедры «Теоретическая механика»

Фролова Ксения

Преподаватель:

Ле-Захаров А.А.

Санкт – Петербург, 2015 г.

**Постановка задачи**

Необходимо построить и исследовать модель плоского тела прямоугольной формы с микроструктурой. Рассмотрена задача распространения волны в теле. Начальное состояние является деформированным (правый слой частиц смещен в сторону тела).

**Используемый метод**

**Описание метода**

Для построения моделей применяется метод динамики частиц. Он состоит в представлении тела совокупностью взаимодействующих частиц (материальных точек или твердых тел), описываемых законами классической механики. Одним из наиболее хорошо разработанных вариантов этого метода является метод молекулярной динамики. В классической молекулярной динамике в качестве частиц выступают атомы и молекулы, составляющие материал. В настоящее время потенциалы межатомного взаимодействия для важнейших материалов достаточно хорошо известны, что позволяет моделировать динамику молекулярных соединений с высокой степенью точности. Метод молекулярной динамики позволяет рассматривать объемы материала размером до кубического микрометра, что соответствует примерно миллиарду частиц (куб 1000 х 1000 х 1000 частиц). Таким образом, практически любые наноструктуры могут быть смоделированы с чрезвычайно высокой степенью точности.

Потенциал взаимодействия в динамике частиц играет такую же роль, что и определяющие уравнения в механике сплошной среды. Однако, структура потенциала неизмеримо

проще, чем у определяющих уравнений, так как он представляет собой скалярную функцию расстояния, в то время, как определяющие уравнения представляют собой операторы, в которые входят тензорные характеристики напряженного состояния и деформирования, а также термодинамические величины. Конкретный вид потенциала взаимодействия частиц определяется из сравнения механических свойств компьютерного и реального материалов.

Уравнение движения частицы выглядит следующим образом:



rk – радиус – вектор частицы;

rkn – радиус, соединяющий частицы;

Ф(rkn ) rkn  - воздействие, которое оказывает на k-ую частицу n-ая частица (в уравнение движения входит суммарное воздействие, которое оказывают на k-ую частицу остальные частицы);

Ф(rkn, vkn ) rkn – консервативное воздействие между k-ой и n-ой частицами - обтекание энергии или, иначе, диссипация (в уравнение движения входит суммарное консервативное воздействие между частицами);

N – общее число частиц;

 отвечает за действие консервативного поля

отвечает за действие неконсервативного поля

**Полученные результаты**

Полученный результат приведен на рис. 1-5:



Рисунок 1. Начальное состояние.



Рисунок 2. Промежуточное состояние – распространение волны в теле.



Рисунок 3. Промежуточное состояние – распространение волны в теле.



Рисунок 4. Система пришла в равновесие.