

УДК 621.382 (075.8)

ББК 32.85я73

К142

*Печатается по решению кафедры радиотехнической электроники
Института нанотехнологий, электроники и приборостроения
Южного федерального университета
(протокол № 8 от 21 апреля 2021 г.)*

Рецензенты:

доктор технических наук, профессор, в.н.с. кафедры радиотехнических
систем ФРТ СПбГЭТУ «ЛЭТИ» *М. И. Богачёв*

кандидат технических наук, доцент кафедры безопасности
информационных технологий Института компьютерных технологий
и информационной безопасности ЮФУ *Е. А. Ищукова*

Клунникова, Ю. В.

К142 Моделирование физических процессов методом молекулярной
динамики : учебное пособие / Ю. В. Клунникова, М. В. Аникеев ; Юж-
ный федеральный университет. – Ростов-на-Дону ; Таганрог : Изда-
тельство Южного федерального университета, 2021. – 91 с.

ISBN 978-5-9275-3919-2

В учебном пособии излагаются основы метода молекулярной динами-
ки, являющегося одним из эффективных методов при моделировании физи-
ческих процессов. Учебное пособие предназначено для подготовки бакала-
ров по направлению 11.03.03 «Конструирование и технология электронных
средств». Пособие рекомендовано для студентов, обучающихся по данному
направлению, а также для специалистов в области конструирования элек-
тронных средств.

УДК 621.382 (075.8)

ББК 32.85я73

ISBN 978-5-9275-3919-2

© Южный федеральный университет, 2021

© Клунникова Ю. В., Аникеев М. В., 2021

© Оформление. Макет. Издательство

Южного федерального университета, 2021

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
1. СТРУКТУРНОЕ ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛОВ	8
2. ОСНОВЫ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	14
2.1. Методы моделирования	14
2.2. Обоснование метода молекулярной динамики	16
2.3. Физические основы метода молекулярной динамики	17
2.4. Области применения методов молекулярной динамики	19
2.5. Ограничения метода молекулярной динамики	20
2.6. Граничные условия, применяемые в методе молекулярной динамики	22
2.7. Термостатирование моделируемой системы	23
2.8. Минимизация энергии	25
2.9. Метод Монте-Карло	25
3. МЕЖАТОМНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ	27
3.1. Силы межмолекулярного взаимодействия	27
3.1.1. Потенциал Леннарда-Джонса	27
3.1.2. Потенциал Морзе	29
3.1.3. Потенциал Букингема	29
3.1.4. Потенциал Стиллинджера – Вебера	29
3.1.5. Потенциал Терсоффа	30
3.1.6. Метод погруженного атома	31
4. ОСНОВНЫЕ АЛГОРИТМЫ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	33
4.1. Алгоритм Верле	34
4.2. Алгоритм предиктор-корректор	35
4.3. Определение простых статистических величин	36
4.4. Функция радиального распределения атомов	38
5. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	39
5.1. Параллельные расчеты методом молекулярной динамики	44

Содержание

5.2. Исследование материалов на основе больших данных	48
6. ПРОГРАММА МОДЕЛИРОВАНИЯ LAMMPS	54
7. ПРОГРАММА OVITO ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ И АНАЛИЗА ИССЛЕДОВАНИЙ	67
КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ	84
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	86
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	87
ПРИЛОЖЕНИЕ	90