

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В.Н. КАРАЗІНА
ННІ «ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ»
КАФЕДРА МАТЕРІАЛІВ РЕАКТОРОБУДУВАННЯ ТА ФІЗИЧНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

Пояснювальна записка

до дипломного проекту (роботи)
БАКАЛАВРА

на тему:

укр. ВРАХУВАННЯ КВАНТОВИХ ЕФЕКТІВ В МЕТОДІ
МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

англ. ACCOUNTING FOR QUANTUM EFFECTS IN THE METHOD OF
MOLECULAR DYNAMICS

Виконав(ла): студент 4 курсу навчання
за ОПП бакалавр
спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали
освітня програма: Прикладна фізика

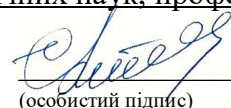
Чуйко Ілля Олегович
(прізвище, ім'я, по батькові)



(особистий підпис)

Керівник доктор технічних наук, професор

Сергій ЛИТОВЧЕНКО



(особистий підпис)

Консультант: наук. співр. ІТФ ННЦ ХФТІ, к. ф.-м.н.
(вчений ступінь, вчене звання)

Василь ЛАПКО

Рецензент: к.ф.-м.н., доц.

Пилип КУЗНЄЦОВ

(прізвище та ініціали)



(особистий підпис)

Харків – 2024 рік

АНОТАЦІЯ

Сторінок: 20, рисунків: 5, таблиць: 1, використаних джерел: 7

Метою цієї роботи є знаходження алгоритму включення в метод холодної молекулярної динаміки атомів із урахуванням квантових ефектів для легких атомів. Розроблено алгоритм включення в метод холодної молекулярної динаміки атомів водню та гелію. Цим легким атомам властиві прояви квантових явищ, таких як нелокальність їх положення. Алгоритм базується на використанні розв'язання рівняння Шредінгера для легких атомів методом Монте-Карло. Метод холодної молекулярної динаміки дозволяє знаходити локальний мінімум потенціальної енергії системи. Легкі атоми, опустившись на дно потенціальної ями, продовжують рухатись. Це так звані нульові коливання. Результати цієї роботи можуть бути застосовані для розрахунків у рамках роботи із процесами, що відбуваються всередині реакторів термоядерного синтезу. Для розвитку роботи, що було виконано, можна провести розрахунки для інших легких атомів.

Значення цієї роботи важко переоцінити, адже врахування квантових ефектів для легких атомів може значно покращити точність моделювання у різних наукових дослідженнях. Використання методу Монте-Карло для розв'язання рівняння Шредінгера відкриває нові перспективи для досліджень у галузі квантової хімії та фізики. Нелокальність положення атомів водню та гелію є важливим фактором, який впливає на їхню поведінку у різних фізичних умовах. Це дозволяє більш точно прогнозувати їхню поведінку у термоядерних реакторах, де точність розрахунків є критично важливою. Метод холодної молекулярної динаміки, що дозволяє знаходити локальний мінімум потенціальної енергії системи, може бути удосконалений шляхом врахування нульових коливань, які продовжуються навіть після досягнення дна потенціальної ями. Це відкриває нові можливості для моделювання динамічних процесів у термоядерних реакторах. Застосування отриманих результатів у розрахунках, пов'язаних із процесами всередині реакторів термоядерного синтезу, може привести до створення більш ефективних та безпечних технологій. Перспективи для подальших досліджень включають проведення розрахунків для інших легких атомів, що дозволить розширити сферу застосування методу холодної молекулярної динаміки та покращити його ефективність у різних наукових та інженерних галузях.

Ключові слова: молекулярна динаміка, рівняння Шредінгера, метод Монте-Карло, нульові коливання.

ABSTRACT

Pages: 20, figures: 5, tables: 1, used sources: 7

The objective of this work is to develop an algorithm for incorporating quantum effects for light atoms into the method of cold molecular dynamics. An algorithm has been developed to include hydrogen and helium atoms in the cold molecular dynamics method. These light atoms exhibit quantum phenomena, such as the nonlocality of their positions. The algorithm is based on solving the Schrödinger equation for light atoms using the Monte Carlo method. The cold molecular dynamics method allows finding the local minimum of the system's potential energy. Light atoms, once at the bottom of the potential well, continue to move. These are the so-called zero-point vibrations. The results of this work can be applied to calculations within the framework of processes occurring inside thermonuclear fusion reactors. To further develop this work, calculations can be performed for other light atoms.

The significance of this work is difficult to overestimate, as considering quantum effects for light atoms can significantly improve the accuracy of modeling in various scientific studies. The use of the Monte Carlo method to solve the Schrödinger equation opens new perspectives for research in the fields of quantum chemistry and physics. The nonlocality of the positions of hydrogen and helium atoms is an important factor that affects their behavior under different physical conditions. This allows for more accurate predictions of their behavior in thermonuclear reactors, where calculation accuracy is critically important. The cold molecular dynamics method, which allows finding the local minimum of the system's potential energy, can be improved by accounting for zero-point vibrations, which continue even after reaching the bottom of the potential well. This opens up new possibilities for modeling dynamic processes in thermonuclear reactors. Applying the results obtained in calculations related to processes inside thermonuclear fusion reactors can lead to the development of more efficient and safer technologies. Prospects for further research include performing calculations for other light atoms, which will expand the application scope of the cold molecular dynamics method and enhance its effectiveness in various scientific and engineering fields.

Keywords: molecular dynamics, Schrodinger equation, Monte Carlo method, zero-point oscillations

ЗМІСТ

	ВСТУП	5
1	РОЗДІЛ 1 Метод молекулярної динаміки	7
2	РОЗДІЛ 2 Рішення рівняння Шредінгера методом Монте-Карло	10
3	РОЗДІЛ 3 Холодна молекулярна динаміка	17
	ВИСНОВКИ	19
	ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ	20

ВСТУП

Бурхливе зростання ядерної енергетики та широкий розвиток робіт у галузі термоядерного синтезу послужили потужним стимулом інтенсифікації досліджень у галузі опромінених матеріалів. Створено нову галузь матеріалознавства – атомне, радіаційне матеріалознавство.

Властивості матеріалів завжди були ключовою ланкою, що визначає успіх багатьох інженерних розробок у різних галузях техніки. Особливо їхня роль зросла останнім часом при створенні складних конструкцій, що працюють в екстремальних умовах. Ядерні реактори, устрої термоядерного синтезу – яскравий приклад таких конструкцій. Сотні різних за складом, структурою та способами виготовлення матеріалів забезпечують їхню працездатність. Але, потрапляючи в умови високих потоків опромінення (до 10^{20} нейтр/м²·с) та великих флюенсів (до 10^{27} - 10^{28} нейтр/м²), вони зазнають значних структурних перебудов (радіаційне ушкодження). Наслідком цих перебудов є різка зміна всіх фізичних властивостей матеріалів. Причому ці зміни мають зовсім незвичайний характер. Раніше нічого подібного не зустрічалося у практиці робіт із різними матеріалами. Так, були виявлені абсолютно нові явища, що відбуваються з опроміненими матеріалами та сплавами: радіаційне крихтіння, радіаційне розпухання, радіаційне зміцнення, прискорена дифузія, радіаційно-індуковані фазово-структурні перетворення та ін.

Для дослідження в галузі радіаційного матеріалознавства залучаються найсучасніші фізичні методи аналізу структури матеріалів, починаючи з традиційного рентгеноструктурного аналізу і закінчуючи автоіонною мікроскопією, екс-спектроскопією та ін. З іншого боку в радіаційному матеріалознавстві все частіше залучається комп'ютерний експеримент. Огляд методів комп'ютерного моделювання, що використовуються в радіаційному матеріалознавстві, можна знайти в [1-2].

Метод молекулярної динаміки (МД) - один із найбільш потужних методів, які використовуються для комп'ютерного моделювання в радіаційному матеріалознавстві. Він дозволяє проводити детальні дослідження структури матеріалів, виходячи з перших принципів шляхом розв'язання ньютонівських рівнянь руху для атомів. Умови застосування методу молекулярної динаміки добре виконуються для важких атомів. Однак для легких атомів (водень, гелій) умови застосування виконуються значно гірше, особливо при низьких температурах. Для них стає можливим прояв квантових властивостей. Гелій неминуче з'являється в матеріалах атомних реакторів внаслідок

альфа-розпадів продуктів поділу так і в матеріалах термоядерних реакторів внаслідок реакції ${}^2\text{H} + {}^3\text{H} = \text{n} + {}^4\text{He}$.

Метою роботи є розширення методу молекулярної динаміки для врахування квантових властивостей легких атомів. Показано, що це можна зробити для так званого методу холодної молекулярної динаміки, використовуючи рішення рівняння Шредінгера методом Монте-Карло.

РОЗДІЛ 1

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

В методі молекулярної динаміки координати та швидкості атомів знаходять, чисельно вирішуючи рівняння руху Ньютона для заданих потенціалів взаємодії між атомами. Потім, знаючи координати та швидкості атомів, за допомогою відповідного усереднення, обчислюють макроскопічні величини, такі як температура, тиск, тензор напруги і т.д. Важливість методу полягає у можливості отримати фізичні величини з перших принципів, тобто використовуючи лише рівняння руху та потенціал міжатомної взаємодії.

В молекулярній динаміці найчастіше використовується алгоритм інтегрування за часом який називається алгоритм Верле [3]. Основна ідея полягає в тому, щоб записати розкладання Тейлора до третього порядку вперед і назад за часом. Нехай \vec{v} позначає швидкість, \vec{a} - прискорення та \vec{b} - третю похідну від r по t . Тоді маємо:

$$\begin{aligned}\vec{r}(t + \Delta t) &= \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2} + \frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6} + O(\Delta t^4), \\ \vec{r}(t - \Delta t) &= \vec{r}(t) - \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2} - \frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6} + O(\Delta t^4).\end{aligned}\tag{1.1}$$

Складаючи ці 2 вирази отримаємо

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4).\tag{1.2}$$

Це основна формула алгоритму Верле. Оскільки ми інтегруємо рівняння Ньютона, то $\vec{a}(t)$ є просто сила, поділена на масу, і сила в свою чергу є функція положення $\vec{r}(t)$

$$\vec{a}(t) = -\nabla U(\vec{r}(t))/m.\tag{1.3}$$

Видно, що помилка обриву алгоритму, коли система еволюціонує протягом часу Δt , є величина порядку Δt^4 .

Проблема з цією версією алгоритму Верле у тому, що швидкості явно не обчислюються. Щоб подолати цю проблему, були розвинені варіанти алгоритму Верле. Кращою реалізацією того ж основного алгоритму є так званий алгоритм Верле зі швидкістю, коли положення, швидкості та прискорення в момент часу $t + \Delta t$ знаходять за допомогою тих самих величин у момент часу t наступним чином:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2}\tag{1.4}$$

$$\begin{aligned}\vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) &= \vec{v}(t) + \vec{a}(t)\Delta t/2 \\ \vec{a}(t + \Delta t) &= -\frac{\nabla U(\vec{r}(t + \Delta t))}{m} \\ \vec{v}(t + \Delta t) &= \vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \vec{a}(t + \Delta t)\Delta t/2.\end{aligned}$$

Для моделювання матеріалу необхідно задати потенціал взаємодії складових його атомів. Найбільш простим є парний потенціал Леннарда-Джонса

$$U_{LD}(r) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right). \quad (1.5)$$

Тут, r - відстань між атомами, ε - глибина потенційної ями і σ пов'язано з положенням мінімуму потенціалу $r_{min} = 2^{1/6}\sigma$. Потенціал Леннарда-Джонса якісно правильно описує взаємодію між атомами - сильне відштовхування на малих відстанях, обумовлене першим доданком у дужках, і притягіння на великих відстанях, за яке відповідає другий доданок у дужках. Він добре описує ван-дер-ваальсівську взаємодію між атомами кристалів благородних газів, але внаслідок своєї простоти часто використовується для якісного опису взаємодії інших атомів. З потенціалом Леннарда-Джонса проведено велику кількість обчислень. Він є стандартним модельним потенціалом для обчислень методом МД.

В методі молекулярної динаміки кінетична та потенційна енергія системи знаходяться як

$$K = \sum_i \frac{m_i v_i^2}{2} \quad (1.6)$$

$$U = \sum_{i>j} \sum_j U_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j). \quad (1.7)$$

Температура визначається як

$$K = \frac{d}{2} NkT, \quad (1.8)$$

де d – розмірність системи.

Число атомів, з якими виконується моделювання методом молекулярної динаміки, набагато менше від числа атомів, що входять до складу макроскопічних систем. Щоб результати нашого моделювання можна було поширити на макроскопічні тіла, роблять припущення, що макроскопічні системи складаються з нескінченного числа комірок моделювання, що періодично повторюються.

Зазначимо обмеження, властиві методу молекулярної динаміки. Обмеження пов'язані з використанням класичних рівнянь руху Ньютона, хоча відомо, що системи на атомному рівні підпорядковуються скоріше квантовим законам, аніж класичним.

Найпростіша перевірка застосування класичного наближення базується на тепловій довжині хвилі де-Бройля, яка визначається як

$$\lambda_{\text{th}} = \hbar \sqrt{\frac{2\pi}{mk_B T}} \quad (1.9)$$

де \hbar – постійна Планка, m – атомна маса, k_B – постійна Больцмана та T – температура.

Класичне наближення добре працює коли $\lambda_{\text{th}} \ll a$ де a - середня відстань між атомами.

Якщо розглядати, наприклад, рідину в потрійній точці, то $\frac{\lambda_{\text{th}}}{a}$ порядку 0.1 для легких елементів, таких як Li та Ar, зменшуючись для більш важких елементів. Класичне наближення погано працює для легких систем, таких як H_2 , He.

Крім того, квантові ефекти стають важливими для будь-яких систем, коли температура T є досить низькою. Падіння питомої теплоємності кристалів нижче температури Дебая є добре відомим прикладом квантових ефектів у твердих тілах.

При виконання розрахунків необхідно приділяти увагу підготовці початкового стану. Так, наприклад, у кристалах якщо не вжити спеціальних заходів при підготовці початкового стану системи, то можуть виникнути колективні рухи – коливання. Це пов'язано з тим, що кристал може опинитися в стислому або розтягнутому стані через невідповідність температури системи та постійної кристалічної ґратки. Тобто це теплове розширення (стиснення) системи. Такі коливання мають великий період і слабо згасають. Накладаючись на процес, який досліджується, вони спотворюють картину цього процесу.

Для моделювання опроміненого кристала необхідно ввести дефекти, вакансії та міжузельні атоми. Початкові стани, що містять такі дефекти, легко приготувати, стартуючи з початкового стану довершеного кристала. Для цього необхідно видалити атоми кристала для утворення вакансій та додати для утворення міжузельних атомів. При цьому відстань від цих атомів до найближчих атомів кристала зазвичай набагато менша, ніж рівноважні відстані між атомами в кристалі. Через сильне зростання потенціалу міжатомної взаємодії на малих відстанях такі атоми мають велику потенційну енергію. Якщо не вжити спеціальних заходів, це може спричинити розліт кристала. Щоб запобігти цьому використовують так звану холодну молекулярну динаміку. При цьому кінетична енергія атомів видаляється, тоді як потенційна енергія наближається до локального мінімуму. Така процедура дозволяє швидко змістити атоми біля введеного міжузельного атома на рівноважні відстані, не допускаючи нагрівання кристала.

РОЗДІЛ 2

РІШЕННЯ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Розглянемо спочатку застосування методу Монте-Карло на прикладу пружного розсіяння нейтронів у речовині. Нейтрон із постійною швидкістю v рухається через речовину, доки не розсіється на атомному ядрі. Будем вважати, що атомні ядра досить важкі, так що розсіяння зводиться лише до зміну напрямку швидкості нейтрона. Ймовірність розсіяння dW на шляху від x до $x + dx$ (відповідно за час від t до $t + dt$) дорівнює

$$dW = n(x)\sigma dx = n(x)\sigma v dt = n(x)v dt \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \quad (2.9)$$

де $n(x)$ – густина атомних ядер, σ – повний переріз розсіяння, $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ – диференціальний переріз розсіяння в заданий тілесний кут. Випадковий час T до розсіяння можна знайти вирішуючи рівняння [4]

$$\xi = 1 - \exp\left(-\int_0^T n(x)\sigma v dt\right), \quad (2.9)$$

де ξ – випадкове число, рівномірно розподілене від 0 до 1. Швидкість нейтрону після розсіяння знаходиться за допомогою диференціального перерізу $\frac{d\sigma}{d\Omega}$.

Таким чином, для застосування методу Монте-Карло в класичній механіці необхідно задати похідну $\frac{dW}{dt}$, яка визначає швидкість переходу частинки з вільного стану в інші вільні стани [5]. Зазначимо, що в розсіянні нейтронів похідна $\frac{dW}{dt}$ була знайдена у припущенні вільного (з постійною швидкістю) руху у шарі речовини завтовшки dx . Швидкість переходу частинки з одного вільного стану до іншого в квантовій механіці можна знайти з рівняння Шредінгера [6]. В одновимірному випадку для частинки з масою m , яка знаходиться в потенціалі $U(x)$, рівняння Шредінгера має вигляд

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi, \quad (2.9)$$

де \hbar стала Планка, ψ – хвильова функція. Розглянемо рівняння Шредінгера для вільної частинки

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_0(x, t). \quad (2.9)$$

Нехай в початковий момент часу частинка перебувала у точці x' , тобто її хвильова функція була $\psi_0(x, 0) = \delta(x - x')$, тоді рішення вільного рівняння Шредингера має вигляд

$$\psi_0(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left[-\left(\frac{m}{2i\hbar t}\right)(x - x')^2\right]. \quad (2.9)$$

Воно описує розпливання δ – подібної на початку хвильової функції. За відсутності потенціалу розпливання хвильової функції тривало б безкінечно, але дія потенціалу призводить до того, що в якийсь момент часу розпливання з точки x' припиниться і почнеться розпливання з деякої іншої точки x'' і т.д. Знайдемо швидкість переходу з вільного стану, що описується хвильовою функцією ψ_0 в інший вільний стан, що описується хвильовою функцією ψ . Для цього підставимо ψ_0 в праву сторону рівняння (2.3) і перетворимо ліву частину рівняння. Маємо

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial(\psi - \psi_0)}{\partial t} + i\hbar \frac{\partial \psi_0}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_0 + U(x)\psi_0. \quad (2.8)$$

Звідси знаходимо потрібну швидкість переходу з вільного стану ψ_0 в інший вільний стан ψ

$$\frac{\partial(\psi - \psi_0)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} U(x)\psi_0. \quad (2.9)$$

Іншими словами, це швидкість переходу від розпливання з точки x' до розпливання з іншої точки x . В точці x' частинка була в початковий момент часу, а в момент часу t частинка перейшла в точку x .

Вираз (2.5) для ψ_0 містить осцилюючі функції, ці осциляції пригнічують переходи в далекі точки. Виконаємо віковський поворот, замінивши it на дійсне β . При цьому осцилюючі функції в ψ_0 заміняться на гауссіан, який спадає на нескінченності

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\beta}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar\beta}(x - x')^2\right].$$

Отже стає наглядно видно, що переходи відбуваються переважно між близькими точками x' і x . Переходи між далекими точками пригнічені.

Маємо

$$\frac{\partial(\psi - \psi_0)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\hbar} U(x)\psi_0. \quad (2.8)$$

Цей вираз аналогічний диференціальному перерізу розсіяння в заданий тілесний кут $d\sigma/d\Omega$ в пружному розсіянні нейтронів. Щоб знайти повну швидкість переходу із точки x' , тобто. швидкість переходу з точки x' , у всі інші точки x необхідно вираз (2.8) проінтегрувати по x

$$-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} U(x) \psi_0 dx = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} U(x' + y) \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\beta}} \exp\left(-\frac{my^2}{2\hbar\beta}\right) dy. \quad (2.9)$$

Розглянемо докладніше аналогію із розсіянням нейтрона. В обох випадках спочатку виконується деякий регулярний рух. Це рух із постійною швидкістю у разі нейтрона та розпливання із заданого центру для квантової частинки. Потім відбувається розсіяння і рух з новою постійною швидкістю для нейтрона та розпливання з нового центру для квантової частинки. Вся історія руху може бути побудована із повторення таких дій (табл. 2.1).

Розглянемо, як приклад, частинку в одновимірному параболічному потенціалі $U(x) = ax^2$. Нехай частинка в початковий момент часу має координату x_0 , тоді

$$-\frac{1}{\hbar} U(x) \psi_0 = -a/\hbar (y^2 + 2x_0 y + x_0^2) \sqrt{(m/2\pi\hbar\beta)} \exp(-(my^2)/2\hbar\beta), \quad (2.10)$$

де $y = x - x_0$.

Таблиця 2.1

Нейтрон	Квантова частинка
Регулярний рух	
Рух з постійною швидкістю	Розпливання із заданого центра
Перехід до нового регулярного руху з новими параметрами	
Розсіяння	Перехід до розпливання із нового центра
Швидкість переходу в заданий кінцевий стан	
$nv \frac{d\sigma}{d\Omega}$	$U\psi_0 = U \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\beta}} \exp\left[-\left(\frac{m}{2\hbar\beta}\right)(x - x')^2\right]$
Швидкість переходу у всі кінцеві стани	
$nv\sigma = nv \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$	$\int U(x)\psi_0 dx$
Розіграш часу до переходу	
$\xi = 1 - \exp\left(-\int_0^T n(x)\sigma v dt\right)$	$\xi = 1 - \exp\left(-\int_0^T \int U\psi_0 dx d\beta\right)$
Розіграш нових параметрів	
Швидкість після розсіяння	Положення нового центра розпливання

При інтегруванні по кінцевих станах ненульовий внесок дають тільки парні члени y^2 і x_0^2 , вклад від y зникає через непарність

$$\int_{-\infty}^{+\infty} U(x)\psi_0 dx = a(\beta + x_0^2) \quad (2.11)$$

Однак при цьому вклад парних членів y^2 і x_0^2 в середнє зміщення $\langle y \rangle$ дорівнює нулю, ненульовий вклад дає лише непарний член. Таким чином парні члени можна відкинути, головний внесок даватиме непарний член

$$-1/\hbar U(x) \psi_1^0 = -(2ax_1^0 y)/\hbar \sqrt{(m/2\pi\hbar\beta)} \exp(-(my^2)/2\hbar\beta). \quad (2.92)$$

Беручи до уваги, що $F = -\partial U/\partial x$, де F – сила, отримуємо остаточну формулу

$$-1/\hbar U(x) \psi_1^0 = Fy/\hbar \sqrt{(m/2\pi\hbar\beta)} \exp(-(my^2)/2\hbar\beta). \quad (2.93)$$

Інтерпретувати формулу можна таким чином. Спочатку частинка розпливаючись обмацує околиці. Частинка при цьому може бути де завгодно відповідно до розподілу $\sqrt{(m/2\pi\hbar\beta)} \exp(-(my^2)/2\hbar\beta)$. Потім частинка відчує дію сили, частинка вилучається там, де розподіл (2.13) негативний і додається туди, де розподіл (2.13) позитивний [7]. Іншими словами положення частинки через час β буде випадковим і воно буде вибиратися із розподілу (2.13) для тих y , для яких $Fy > 0$.

Проінтегрувавши (2.13) по y знайдемо швидкість переходу у всі кінцеві стани

$$\frac{|F|}{m} \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar}} \sqrt{\beta} \quad (2.94)$$

Далі вирішуючи рівняння

$$\xi = 1 - \exp\left(-\int_0^T \frac{|F|}{m} \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar}} \sqrt{\beta} d\beta\right), \quad (2.95)$$

де ξ - випадкове число, рівномірно розподілене від 0 до 1, знаходимо час вільного пробігу T

$$T = \left(-\ln\xi \frac{3m}{2|F|} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2m}}\right)^{2/3}. \quad (2.96)$$

Потім знаходимо координату y нового центру розпливання

$$y = \sqrt{-\frac{2\hbar T}{m} \ln\xi}, \quad (2.97)$$

де ξ - випадкове число, рівномірно розподілене від 0 до 1.

На рис. 2.1 представлена історія частинки у потенціальній ямі з гармонічним потенціалом.



Рисунок 2.1 Історія руху частинки в гармонічному потенціалі $U = ax^2$. По осі ординат координата частинки, по осі абсцис час.

Якщо простежити досить довго історію частинки в околиці дна потенціальної ями і потім усереднити координати частинки за часом, то отриманий розподіл по координатам повинен збігатися з хвильовою функцією основного стану гармонічного осцилятора. На рис. 2.2 представлена хвильова функція основного стану та розподіл частинки за координатами. Хвильова функція нормована так, що інтеграл від неї дорівнює 1. Видно, що розподіл частинки по координатам дещо ширший за хвильову функцію.

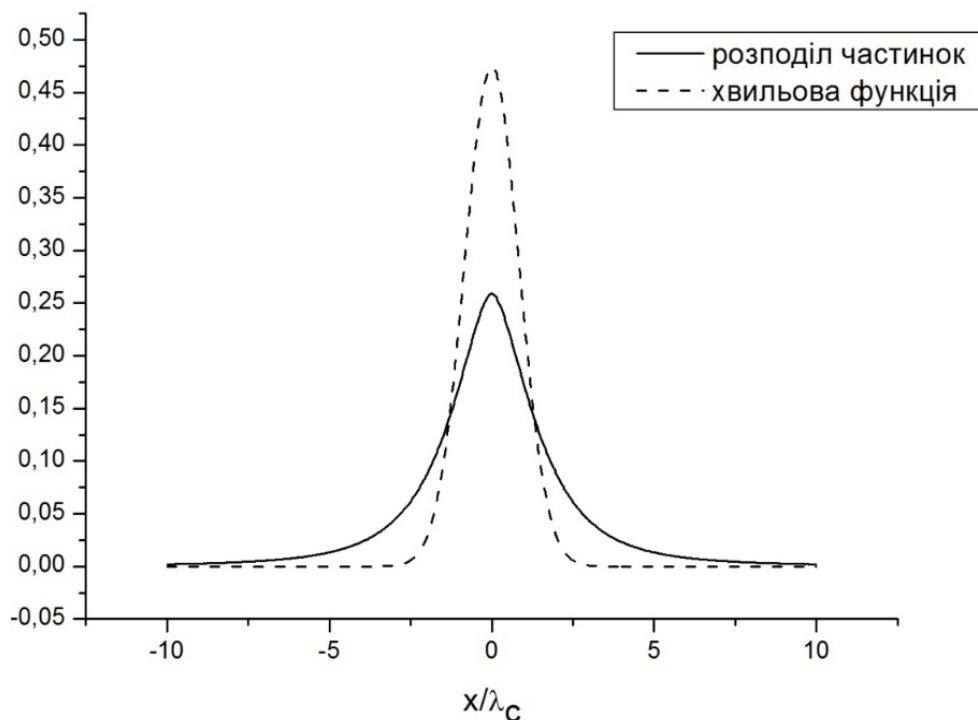


Рисунок 2.2 Порівняння розподілу координат частинки усередненого за часом з хвильовою функцією основного стану гармонічного осцилятора.

У початковий момент частинка перебувала у точці $x/\lambda_c = 10$. Під дією сили відповідно до (2.13) частинка зсувається до дна ями. Стан частинки описується лише її положенням, вона не має швидкості. Відповідно, у неї немає кінетичної енергії, тому опустившись на дно вона не може більше піднятися. Частинка залишатиметься на околиці дна здійснюючи так звані нульові коливання..

Порівняємо тепер рух квантової частинки та класичної частинки. Нехай сила, яка діє на частинки, не залежить від положення частинок. Історія руху квантової частинки визначається формулами (2.16, 2.17). Оскільки у квантової частинки немає швидкості зміщення класичної частинки за час вільного пробігу квантової частинки T визначається без швидкості, тобто визначається тільки прискоренням a

$$\Delta x = aT^2/2. \quad (2.98)$$

На рис. 2.3 представлені історії руху класичної та квантової частинок. Видно, що квантова частинка рухається поблизу класичної частинки..

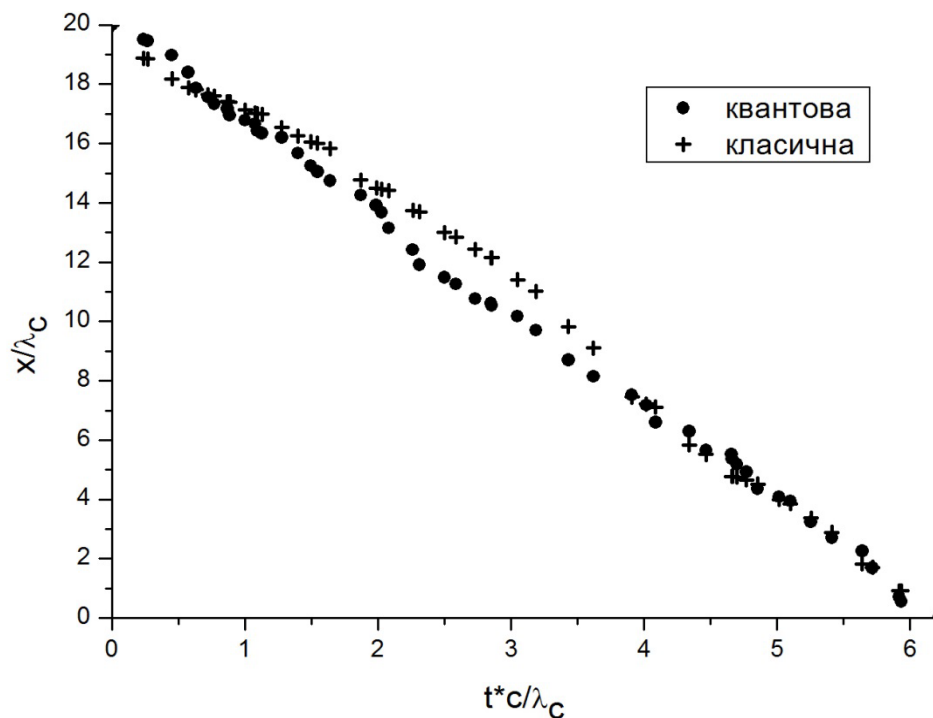


Рисунок 2.3 Історія руху класичної і квантової частинок. Квантова частинка рухається поблизу класичної частинки.

РОЗДІЛ 3

ХОЛОДНА МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА

Нехай є кристал, що складається з важких атомів. Рух атомів описується класичною механікою. У кристал вводиться легкий атом домішки, який описується квантовою механікою. Отримана система є дуже нерівноважною. Потрібно привести її до механічної рівноваги розсунувши атоми кристала, щоб у ньому міг поміститися атом домішки.

Застосування звичайних методів молекулярної динаміки може не призвести до успіху. Потенційна енергія системи через сильне відштовхування на малих відстанях може виявитися настільки великою, що система розлетиться. Навіть якщо цього немає в системі виникнуть колективні коливання, які слабко згасають. Що значно збільшує час, необхідний для досягнення рівноваги. За цих коливань потенційна енергія системи перетворюється на кінетичну енергію складових її атомів і навпаки.

Щоб цього не відбувалося, необхідно тим чи іншим способом вилучати кінетичну енергію з системи. Система при цьому переходить в мінімум потенційної енергії без коливань. Оскільки кінетична енергія системи пов'язана з температурою системи, отримуємо так звану холодну молекулярну динаміку.

Один із алгоритмів холодної молекулярної динаміки є таким. Після кожного кроку за часом молекулярної динаміки для кожного атома обчислюється скалярне добуток між швидкістю та силою. Для атомів, скалярний добуток яких негативний, швидкість зануляється, оскільки ці атоми рухаються у напрямку, у якому потенційна енергія зростає. Таким чином, кінетична енергія атомів видаляється, тоді як потенційна енергія наближається до локального мінімуму енергії вздовж руху атома. Така процедура дозволяє швидко помістити атоми біля введеного атома на рівноважні відстані.

Оскільки в запропонованому описі руху квантової частинки вона не має швидкості, має сенс використовувати такий алгоритм холодної молекулярної динаміки, в якому атоми не мають швидкості. Саме зміщення атома Δx за час Δt визначається лише прискоренням a (2.18). Швидкість атома після зміщення знову покладається рівною нулю. Таким чином, кінетична енергія атомів занулюється, а атоми наближаються до локального мінімуму потенційної енергії вздовж напрямку дії сили. Рух квантової частинки описується формулами (2.16, 2.17). Спочатку розігрується час вільного пробігу, потім координати нового центру розпливання.

Розглянемо просту задачу у рамках холодної молекулярної динаміки. Нехай є один важкий атом і один легкий атом. Важкий атом описується класичною механікою, а легкий атом — квантовою механікою. Задамо взаємодію між ними, наприклад, у вигляді потенціалу Леннарда-Джонса. Простежимо історію руху атомів. Задамо початкову відстань між атомами. Обчислимо силу, що діє на легкий атом. Розіграємо час вільного пробігу та потім координату легкого атома. Зміщення важкого атома знайдемо за формулою (2.18), підставивши T час вільного пробігу. Визначимо відстань між атомами та повторимо обчислення для нової відстані. Атоми при цьому будуть зсовуватися (розсовуватися) доки відстань між ними не буде відповідати мінімуму потенціалу. Якби обидва атоми були важкими та описувалися класичною механікою, опустившись на дно потенціальної ями вони б зупинилися. Піднятися вгору заважає відсутність кінетичної енергії. Легкий атом опустившись на дно потенціальної ями буде здійснювати так звані нульові коливання. Підштовхуючи при цьому важкий атом.

Проілюструємо це на прикладу атома гелію і атома заліза. Прийmemo радіус атома гелію 30 пм, радіус атома заліза 140 пм. Рівноважна відстань між ними 170 пм. Прийmemo також, що взаємодія між ними описується потенціалом Леннарда-Джонса з глибиною потенційної ями $\epsilon = 1\text{эВ}$ і параметром $\sigma = \frac{170\text{пм}}{2^{1/6}}$. Координати атомів вимірюємо у σ , а час у σ/c , де c — швидкість світла.

На рис. 3.1 приведена історія руху атомів гелію та заліза, початкова відстань між атомами 2.5σ . Атоми зближуються до рівноважної відстані, потім атом гелію здійснює нульові коливання на дні потенціальної ями, підштовхуючи при цьому атом заліза.

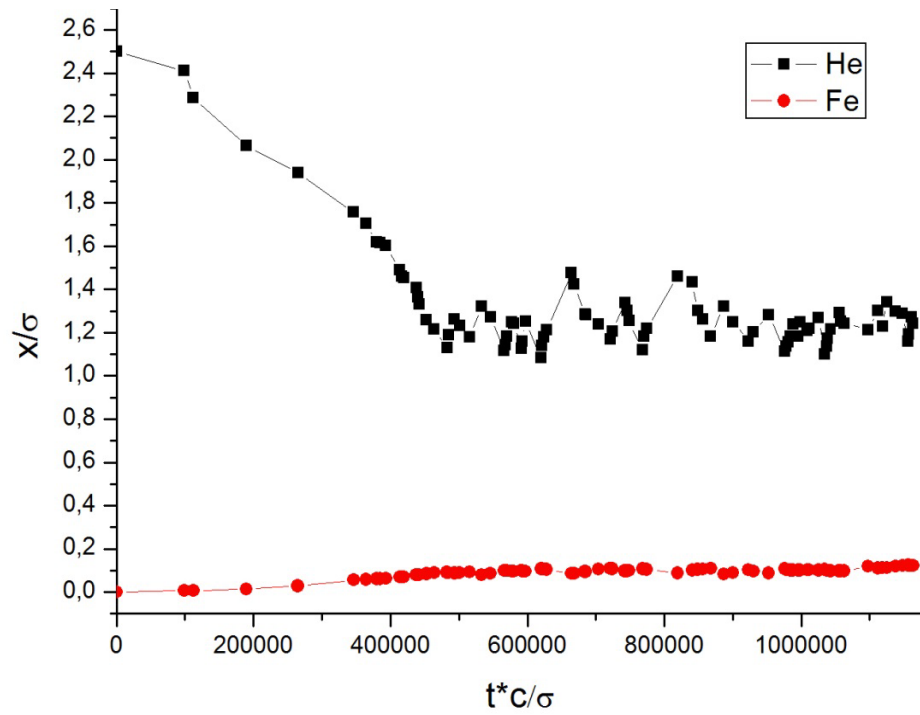


Рисунок 3.1 Історія руху атомів гелію та заліза, початкова відстань між атомами 2.5σ .

На рис. 3.2 наведена історія руху атомів гелію та заліза, початкова відстань між атомами 1.0σ . Атоми розходяться до рівноважної відстані, потім атом гелію здійснює нульові коливання.

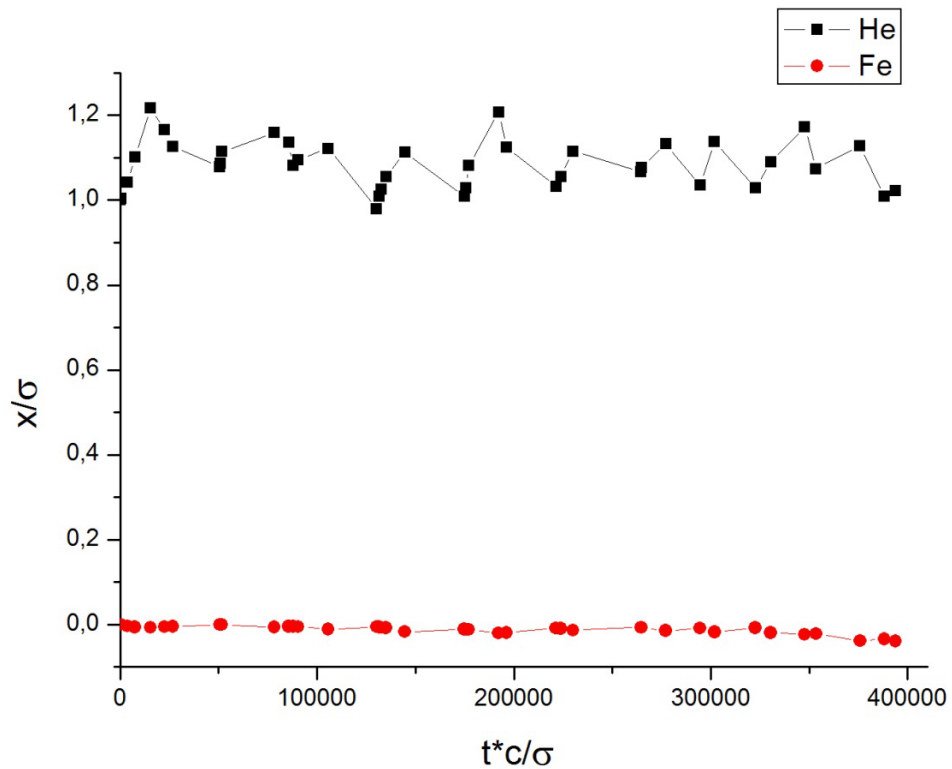


Рисунок. 3.2 Історія руху атомів гелію та заліза, початкова відстань між атомами 1.0σ .

ВИСНОВКИ

Показана можливість застосування вирішення рівняння Шредінгера методом Монте-Карло в холодній молекулярній динаміці для врахування квантових властивостей легких атомів. Розроблено алгоритм розрахунків з легкими атомами для випадку коли крок по часу задається легкими атомами. Приведені результати розрахунків для системи із атома гелію та атома заліза. За результатами роботи можна припустити, що метод може бути застосований для врахування квантових властивостей також і інших частинок.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. J. Zinn-Justin, "Quantum Field Theory and Critical Phenomena" (Oxford University Press, 2002).
2. Gary S. Was, Fundamentals of Radiation Material Science: Metals and Alloys, SpringerNature, New York, 2017.
3. L.Verlet, Phys. Rev. 159, 98 (1967); Phys. Rev. 165, 201 (1967).
4. M. Hammersley and D.C. Handscomb, "Monte Carlo Methods" (Methuen, 1964).
5. G. Fishman, "Monte Carlo: Concepts, Algorithms, and Applications" (Springer, 1996).
6. M.E. Fisher, "Renormalization group theory: Its basis and formulation in statistical physics" (Reviews of Modern Physics, 1998).
7. В.П. Лапко, Про моделювання випромінювання релятивістських електронів з урахуванням квантового характеру руху. Тези доповідей XVI Конференції з фізики високих енергій, ядерної фізики та прискорювачів, Харків, 20-23 березня 2018 року, стор. 48.
8. R. P. Feynman, Negative probability, PRINT-84-0846 (CAL-TECH), 1984.