

## Simulace metodou Monte Carlo

### Úkol

Pomocí metody Monte Carlo studujte termodynamické vlastnosti vybraných malých klastrů Lennard-Jonesia a lokalizujte fázové přeměny v nich.

### Použitý software

Předkompilovaný program `u11.exe`, Origin, Moldraw.

### Použité soubory se zdrojovými kódy

V této úloze budete používat předkompilované programy a se zdrojovými kódy pracovat nebudete.

### Popis vstupních souborů

Výpočty jsou připraveny ve složkách LJ3, LJ4 a LJ13, vstupní soubory jsou nastaveny, měnit je proto nebudete. S jejich strukturou se ale určitě seznámte (nápomocny Vám budou komentáře uvedené přímo v nich).

`global.ini` - nastavení velikosti klastru,

`main.ini` - nastavení především délky simulace,

`mc.ini` - nastavení parametrů MC simulace,

`pt.ini` - nastavení počtu paralelních simulací,

`temper.ini` - nastavení teplot, při kterých poběží paralelní MC simulace klastru.

`xyz.ini` - počáteční konfigurace klastru.

### Teorie

**Klastry** jsou slabě vázané shluky několika až několika tisíc částic. Tvoří přechod mezi jednotlivými atomy a molekulami a makroskopickými systémy.

**Lennard-Jonesovy klastry** jsou modelové klastry částic interagujících prostřednictvím párového Lennard-Jonesova potenciálu. Jedná se o zjednodušený model, často však s úspěchem používaný při modelování atomárních klastrů vzácných plynů. Symbolem  $LJ_n$  pak reprezentujeme Lennard-Jonesův klustr o  $n$  částicích.

**Kanonická simulace Monte Carlo** spočívá v generování Markovových řetězců náhodných konfigurací zkoumaného systému, v souladu s kanonickou distribuční funkcí

$$\rho \sim e^{-\frac{W}{k_B T}},$$

a výpočtu konfiguračních částí integrálů statistické termodynamiky prostřednictvím prostých aritmetických průměrů „okamžitých“ hodnot odpovídajících dynamických proměnných,

$$B_{\text{KON}} \equiv \langle b \rangle_{\text{KON}} \equiv \frac{\int_{\Omega^{3N-3}} b(\vec{r}_K) e^{-\frac{W(\vec{r}_K)}{k_B T}} d^3\vec{r} \dots d^3\vec{r}_N}{\int_{\Omega^{3N-3}} e^{-\frac{W(\vec{r}_K)}{k_B T}} d^3\vec{r} \dots d^3\vec{r}_N} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n b(\vec{r}_K^{(i)}).$$

V této úloze pracujeme jen s některými parametry: **vnitřní energií klastru**

$$U \equiv \frac{3N-3}{2} k_B T + \langle W \rangle_{\text{KON}},$$

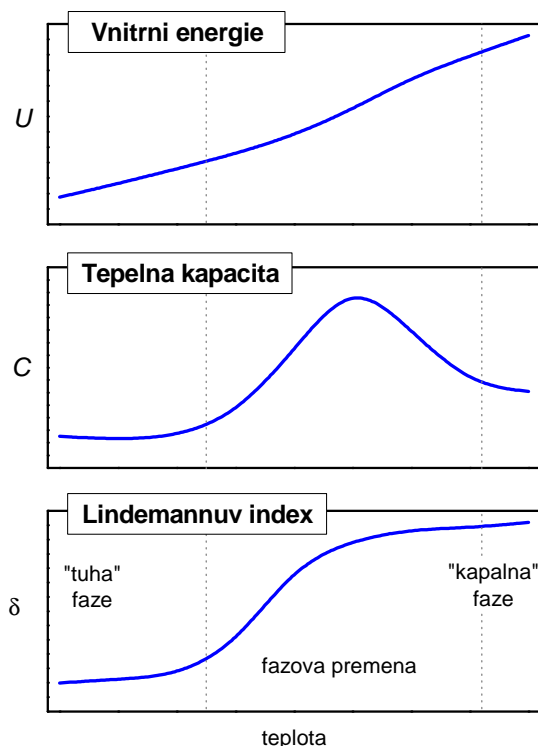
**tepelnou kapacitou**

$$C \equiv \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3N-3}{2} k_B + \frac{1}{k_B T^2} \left( \langle W^2 \rangle_{\text{KON}} - \langle W \rangle_{\text{KON}}^2 \right),$$

a **Lindemannovým indexem** (průměrnou relativní střední kvadratickou fluktuací vzdáleností mezi částicemi)

$$\delta \equiv \frac{2}{N(N-1)} \sum_{I=1}^{N-1} \sum_{J=I+1}^N \frac{\sqrt{\langle r_{IJ}^2 \rangle_{\text{KON}} - \langle r_{IJ} \rangle_{\text{KON}}^2}}{\langle r_{IJ} \rangle_{\text{KON}}}.$$

Teplotní závislosti těchto parametrů jsou vhodné k detekci **fázových přeměn** v klastrech, během nichž se podstatným způsobem mění vnitřní struktura klastrů. Na rozdíl od makroskopických systémů, fázová přeměna neprobíhá v klastru skokově při jediné teplotě, ale v určitém intervalu teplot (o tomto intervalu hovoříme jako o intervalu koexistence dvou fází). Typické průběhy vnitřní energie, tepelné kapacity a Lindemannova indexu na okolí intervalu koexistence jsou znázorněny v obrázku.



Program `u11.exe`, který budete spouštět, provádí Monte Carlo simulaci jednoho systému paralelně, při různých teplotách.

### ***Postup práce***

1. Postupně spusťte výpočty pro klastry LJ<sub>3</sub>, LJ<sub>4</sub> a LJ<sub>13</sub> ve složkách `u11/LJ3`, `u11/LJ4` a `u11/LJ13`. Průběh sledujte v souborech `monitor.txt` umístěných v podsložkách pro jednotlivé teploty.

Pro každý klastr proveďte dále vyhodnocení popsané v následujících krocích (postupně pracujete v složkách LJ<sub>3</sub>, LJ<sub>4</sub> a LJ<sub>13</sub>).

2. Spusťte program Origin a načtěte textový soubor `averages.txt` (zvolte `File/Import/Single ASCII` a vyberte požadovaný soubor).
3. Vykreslete závislosti sledovaných parametrů (vnitřní energie –  $U$ , tepelná kapacita –  $C$ , Lindemannův index –  $\delta$ ) na teplotě a lokalizujte fázové přeměny, tj. pomocí jednotlivých parametrů určete interval teplot, pro které k fázové přeměně dochází, a navzájem je porovnejte. (Pro vykreslení označte vykreslovaný sloupec a klikněte na ikonu čárového grafu. Jednotlivé grafy vhodně pojmenujte.)
4. Vyberte po jedné teplotě z intervalů odpovídajících detekovaným fázovým přeměnám a načtěte z příslušné podsložky soubor `simul.txt`. Vykreslete závislosti okamžitých hodnot potenciální energie na MC kroku a analyzujte je.
5. Pro tyto teploty dále prohlédněte Markovovy řetězce konfigurací klastru pomocí programu MolDraw a zaznamenejte svá pozorování.

### ***Doporučená literatura***

literatura k lekcím 10-12 kurzu KFY/PMFCH

viz <http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce10.pps> nebo <http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce10.pdf>

viz <http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce11.pps> nebo <http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce11.pdf>

viz <http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce12.pps> nebo <http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce12.pdf>

manuál k software Origin