

Seminarium Departamentu Fizyki Materiałów

3 grudzień 2019 (wtorek), godz. 11:30
PNT-NCBJ, sala 223 (NEUTRON)

Krótkie wprowadzenie do obliczeń numerycznych metodą Dynamiki Molekularnej oraz omówienie kilku rezultatów symulacji przeprowadzonych tą techniką

dr Kazimierz Skrobas

Zakład Technologii Plazmowych i Jonowych, DFM, NCBJ

Już od wielu lat rosnące możliwości zarówno komputerów jak i pakietów numerycznych pozwalają na badania wielu zagadnień czy zjawisk niedostępnych dla metod teoretycznych bądź eksperymentalnych. Z wielu specjalności, w których obliczenia numeryczne są ważnym, a często jedynym dostępnym narzędziem, można wyróżnić badania nad wirtualnymi światami składającymi się z tysięcy, a nawet milionów atomów. W szczególności taką metodą stała się dynamika molekularna DM, która jest rozwijana od lat 50-tych zeszłego wieku. DM jest metodą korzystającą bezpośrednio z zasad dynamiki newtonowskiej i jako jedyna pozwala badać materiały w fazie gazowej, płynnej lub stałej w szerokim spektrum warunków wpływających na ich stan, a także na podstawie symulacji antycypować ich własności fizyczne, chemiczne czy przyszłe zastosowania. Istotną zaletą DM jest również to, że obliczenia można przeprowadzić w rozsądnym czasie na znacznej liczbie atomów, a wyniki są ważną podstawą dla kolejnych technik.

Celem niniejszego seminarium jest wprowadzenie do podstaw obliczeń DM opartych na symulacji ewolucji systemu, prezentacja obszaru zastosowań, mocne i słabe strony tej techniki oraz krótkie porównanie z innymi metodami. Zostaną omówione istotne detale, zarówno techniczne jak i fizyczne, w celu przeprowadzenia symulacji wolnej od błędów.

Istotnym zagadnieniem związanym z DM jest analiza pokaźnej liczby danych uzyskanych z symulacji. Dane te zawierają informacje przede wszystkim o położeniach atomów w wybranych temperaturach czy ciśnieniach, ale także wielkości fizyczne charakteryzujące całe ziarno jak: energia całkowita czy entalpia. W czasie seminarium zostanie pokazane jak otrzymywać kluczowe informacje oraz w jaki sposób DM współpracuje z innymi metodami numerycznymi przydatnymi do obróbki danych, w szczególności z metodami pochodzącymi z dyfrakcji XRD czy analizy fourierowskiej wibracji.