МЕТОДЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОМАТЕРИАЛОВ И НАНОСТРУКТУР

ЛЕКЦИЯ 12

Вычислительные методы в нанотехнологиях

Молекулярная динамика, Монте-Карло и расчёты DFT

Кратко: Модели позволяют изучать атомные конфигурации, энергии и процессы, труднодоступные для прямых измерений.

Цель лекции и ожидаемые результаты

Понимать

Объяснить: Зачем нужны вычислительные методы. Модели позволяют изучать атомные конфигурации, энергии и процессы,...

Сопоставлять

Объяснить: Идея метода Монте-Карло. Методы Монте-Карло используют случайную выборку состояний для оценки...

Применять

Объяснить: Проверка достоверности модели. Нужно исследовать сходимость по шагу, размеру ячейки и...

В этой лекции научные определения связываются с измеряемыми величинами, схемами и примерами обработки данных.

Зачем нужны вычислительные методы?

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 01 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Модели позволяют изучать атомные конфигурации, энергии и процессы, труднодоступные для прямых измерений.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Результат зависит от выбранных приближений и границ применимости.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Идея молекулярной динамики

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 02 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Классическая молекулярная динамика интегрирует уравнения движения атомов во времени.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Силы вычисляют из потенциальной энергии взаимодействия частиц.

СООТНОШЕНИЕ

$$m_i \ddot{r}_i = -\nabla_i U$$



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Силовые поля и потенциалы

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 03 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

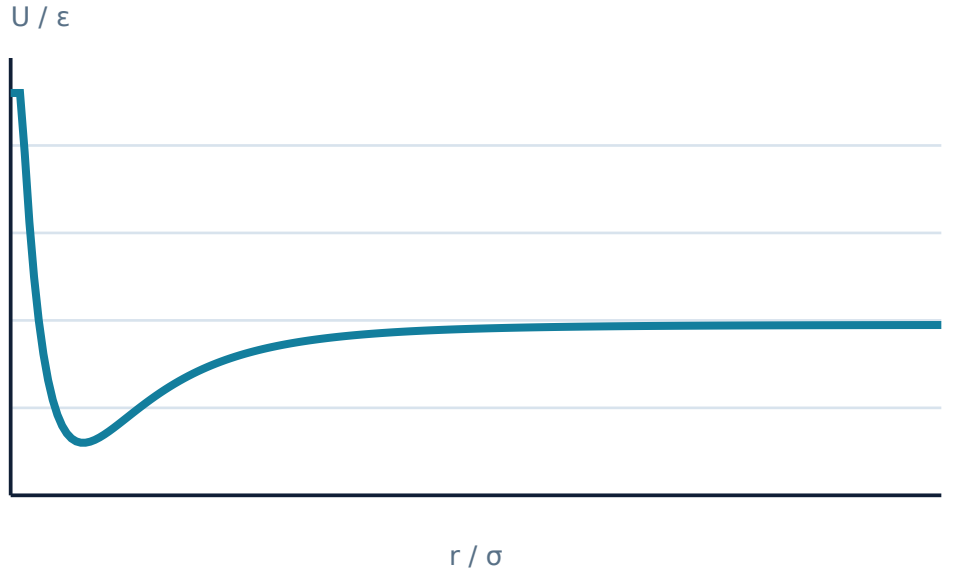
Потенциал Леннарда–Джонса моделирует короткодействующее отталкивание и дисперсионное притяжение.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Для металлов и ковалентных систем часто требуются более сложные потенциалы.

СООТНОШЕНИЕ

$$U(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^{6}]$$



Потенциал Леннарда–Джонса МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Выбор временного шага MD

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 04 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Временной шаг должен разрешать наиболее быстрые существенные колебания атомов.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Слишком большой шаг приводит к численной нестабильности и нарушению сохранения энергии.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Статистические ансамбли

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 05 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Ансамбли NVE, NVT и NPT задают разные контролируемые термодинамические условия.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

При термостатировании важно проверять влияние алгоритма на динамику.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Идея метода Монте-Карло

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 06 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

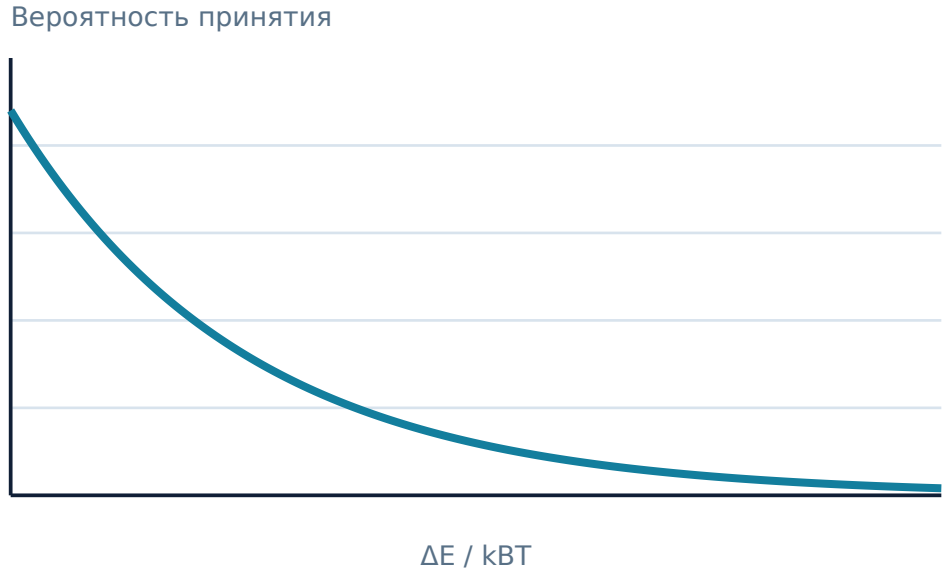
Методы Монте-Карло используют случайную выборку состояний для оценки статистических величин.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Шаг обычного Metropolis MC не следует интерпретировать как физическое время.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Структура · состав · свойства



P = min(1, exp(−ΔE/kBT))

МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Правило принятия Metropolis

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 07 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

При уменьшении энергии предложенная конфигурация принимается всегда в стандартной симметричной схеме.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

При увеличении энергии вероятность принятия убывает экспоненциально с ΔE/kBT.

СООТНОШЕНИЕ

$$P = \min[1, \exp(-\Delta E/kBT)]$$

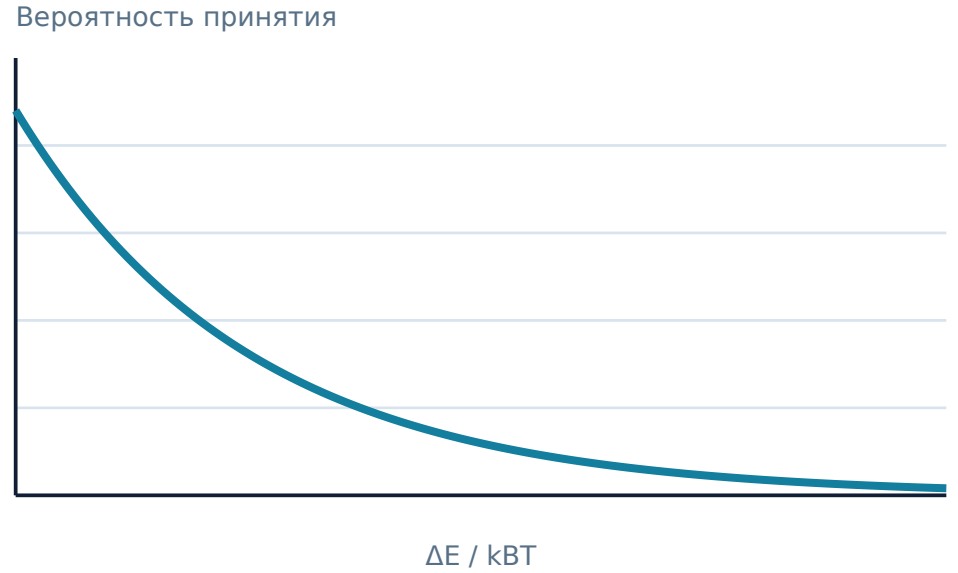


Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Квантовые расчёты ab initio и DFT

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 08 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

В расчётах DFT электронную структуру описывают через электронную плотность.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Приближение для обмена и корреляции влияет на энергию, силы и зонную структуру.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Какие величины даёт DFT?

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 09 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

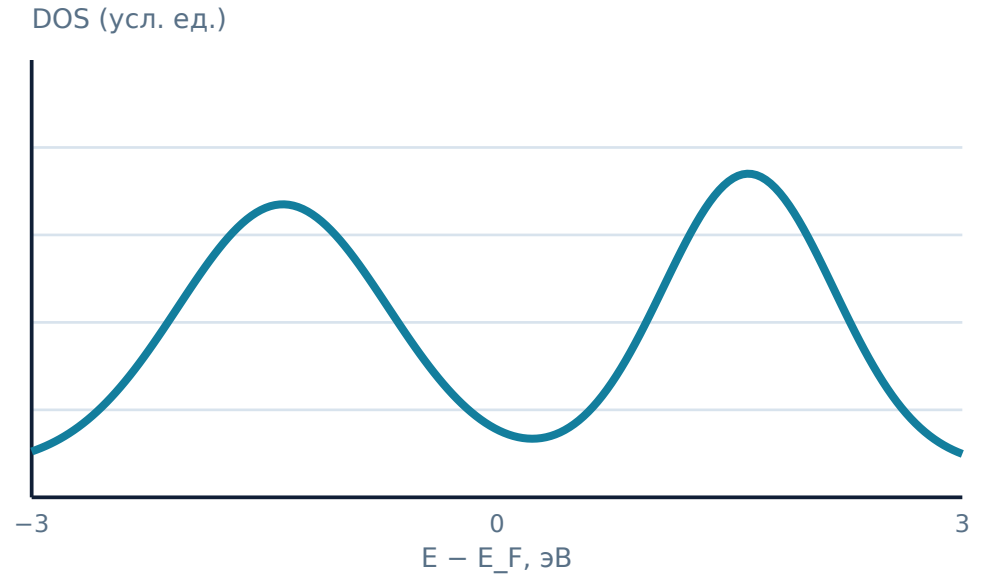
DFT позволяет оценивать полную энергию, геометрию, плотность электронных состояний и энергии адсорбции.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Количественная точность зависит от функционала и параметров расчёта.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Структура · состав · свойства



DFT: модель плотности состояний МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Сравнение масштаба и стоимости

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 10 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

DFT обычно требует больше ресурсов на атом, чем классическая молекулярная динамика.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Классические модели могут охватывать более крупные системы, но зависят от качества силового поля.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Периодические граничные условия

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 11 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Периодическая ячейка приближённо воспроизводит бесконечный кристалл.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Размер вакуумного промежутка, k-сетка и энергия отсечения требуют проверки сходимости.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Сопоставление с экспериментом

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 12 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Расчётные межатомные расстояния сравнивают с XRD, а вибрационные моды — с Raman и FTIR.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Моделирование уточняет механизм, но не заменяет экспериментальную проверку.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Структура · состав · свойства



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Проверка достоверности модели

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 13 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Нужно исследовать сходимость по шагу, размеру ячейки и статистической выборке.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

В отчёте явно указывают допущения, неопределённости и используемые параметры.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Разбор расчётного примера: Вероятность принятия шага МС

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Пусть $\Delta E = 2kBT$; симметричное предложение в алгоритме Metropolis.

РЕШЕНИЕ

$P = \exp(-2) \approx 0{,}1353$, или 13,53%.

КАК ПОНИМАТЬ РЕЗУЛЬТАТ

Для $\Delta E \leq 0$ в этой схеме шаг принимается с вероятностью 100%.

Итоги лекции: главные выводы

Принцип

Потенциал Леннарда–Джонса моделирует короткодействующее отталкивание и...

Применение

В расчётах DFT электронную структуру описывают через электронную плотность. Приближение для обмена и корреляции влияет на...

Ограничения

Нужно исследовать сходимость по шагу, размеру ячейки и статистической выборке. В отчёте явно указывают...

Главный итог: обоснованный научный вывод требует корректной физической модели и проверки измерений.

Контрольные вопросы и литература

ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

1. Чем MD отличается от MC и DFT?
2. Как выбрать временной шаг MD?
3. Какие параметры проверяют на сходимость в DFT?

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Srinivasan et al. Experimental Techniques, 2024

2. Computational materials science and DFT reference literature

Материалы курса, 2026

Самостоятельное задание: назовите измеряемый параметр, предложите метод и укажите возможный источник ошибки.