

сти мощности генерируемого излучения. Плотность мощности для обеих моделей отличается приблизительно в 3,55 раза для большинства углов наблюдения. Основной причиной различия данных графиков является разность показателей преломления среды и частицы. При равенстве этих показателей графики совпадают. Также при различных показателях преломления частицы и окружающей среды на разницу в графиках влияет размер частицы.

Литература

1. Size dependence of second-harmonic generation at the surface of microspheres / S. Viarbitskaya [et al.] // *Physical Review A*. – 2010. – Vol. 81, № 5. – P. 053850.

2. Капшай, В. Н. Генерация второй гармоники от тонкого сферического слоя и условия отсутствия генерации / В. Н. Капшай, А. А. Шамына // *Оптика и спектроскопия*. – 2017 – Т. 123, № 3 – с. 416–429.

Д. А. Горицкая (ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **Е. А. Дей**, канд. физ.-мат. наук, доцент

РЕАЛИЗАЦИЯ ДВУМЕРНОГО МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА ЯЗЫКЕ C#

Методы компьютерного моделирования находят свое применение в решении самых разнообразных задач в таких областях как физика, химия, биология и т. д. Среди этих методов особое место занимает метод моделирования классической динамики системы частиц, который обычно называют как метод молекулярной динамики (МД).

Для описания движения частиц (молекул или атомов) в этом методе применяется классическая механика, при этом силы межчастичного взаимодействия задаются модельным потенциалом взаимодействия. В методе молекулярной динамики моделируется движение для каждой частицы и по результатам моделирования вычисляются физические параметры всей системы.

Для реализации метода молекулярной динамики в двумерной постановке задачи была разработана компьютерная программа на языке C#.

Данная программа содержит следующие компоненты:

- Область, в которой задаются начальная конфигурация и параметры системы;
- Компонент pictureBox, в котором собственно и отображается движение атомов (частиц);
- Область вывода результатов, характеризующих состояние системы;
- Компонент Chart, показывающий зависимость кинетической, потенциальной и полной энергий от числа расчетных шагов программы.

Вид экрана моделирующей программы можно увидеть на рисунке 1.

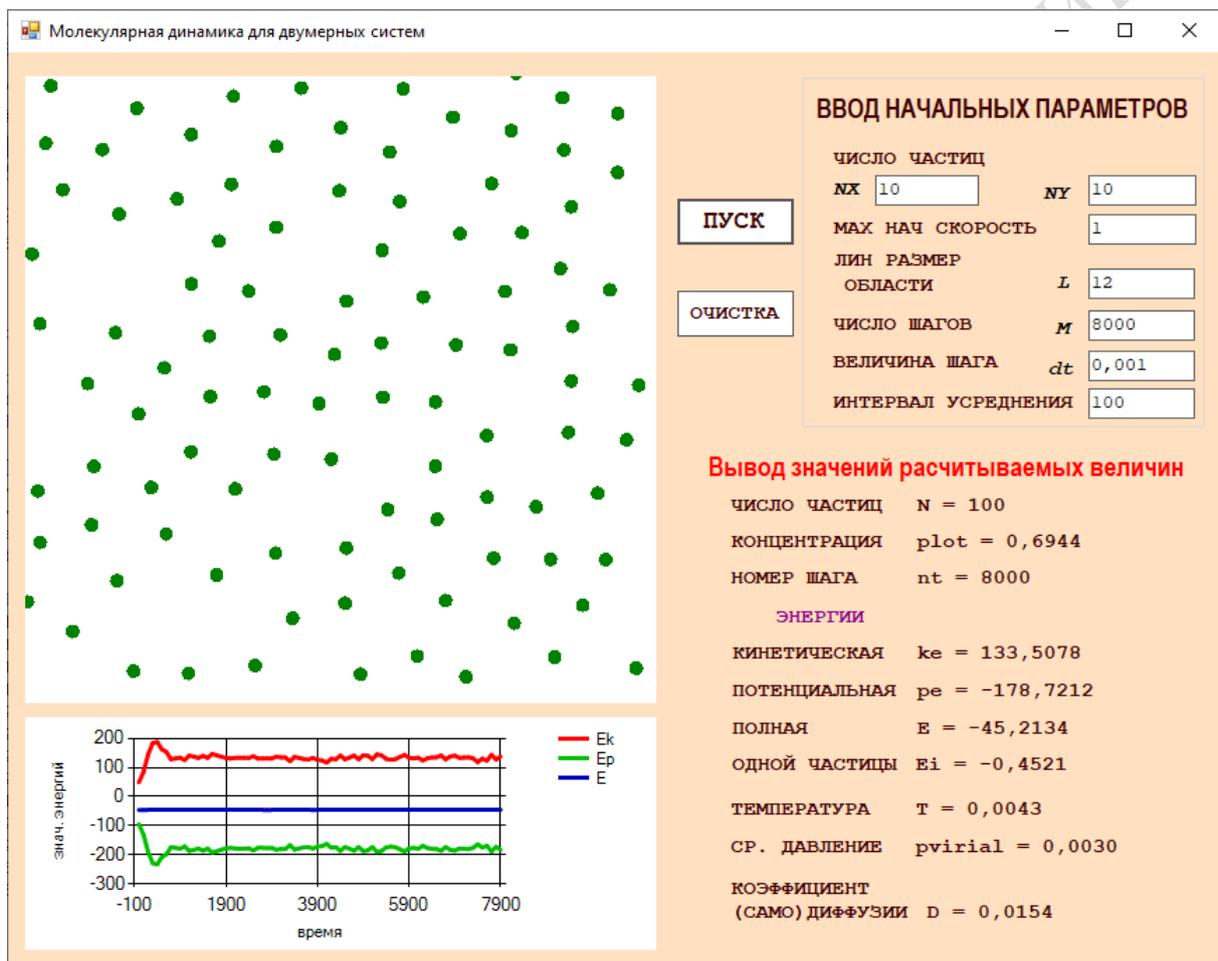


Рисунок 1 – Результат расчета для системы N=100 частиц

Алгоритм реализации моделирования в методе молекулярной динамики можно представить в виде следующих этапов:

1. Задаются начальные условия (количество частиц, размеры моделируемой системы, количество временных шагов и т. д.);
2. Применяются подходящие граничные условия. Частица, покидающая ячейку с одной стороны, попадает в нее в виде ее «образа»

с противоположной грани ячейки. Таким образом, количество частиц в системе сохраняется;

3. Выполняется интегрирование уравнений движения на временном шаге Δt через скоростной алгоритм Верле. Определяются координаты и скорости движения частиц по формулам:

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{V}_i(t)\Delta t + \vec{a}_i(t) \frac{\Delta t^2}{2},$$

$$\vec{V}_i(t + \Delta t / 2) = \vec{V}_i(t) + \vec{a}_i(t) \frac{\Delta t}{2},$$

$$\vec{a}_i(t + \Delta t) = \frac{\vec{F}_i(t)}{m},$$

$$\vec{V}_i(t + \Delta t) = \vec{V}_i(t + \Delta t / 2) + \vec{a}_i(t + \Delta t) \frac{\Delta t}{2};$$

4. Потенциальная энергия и силы межчастичного взаимодействия определяются на основании потенциала Леннарда-Джонса

$$U(r_{ij}) = 4 \left[\left(\frac{1}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

5. Выполняется вычисление термодинамических и кинетических параметров, характеризующих состояние системы (например, температура, давление, потенциальная и кинетическая энергии, коэффициент самодиффузии). Коэффициент самодиффузии D определяется соотношением:

$$D = \frac{R(t)^2}{4t}, \quad R(t)^2 = \langle |r_i(t_2) - r_i(t_1)|^2 \rangle, \quad t = t_2 - t_1.$$

6. Строится изображение частиц, имеющих новые координаты, на компоненте `pictureBox`.

Правильность работы моделирующей программы можно доказать, проверив график зависимости кинетической и потенциальной энергий от времени. Так как система частиц изолирована, то ее полная энергия должна оставаться постоянной.

В примере расчета, представленном на рисунке 1, рассмотрена система $N = 100$ частиц, взаимодействующих в квадратном ящике с линейным размером $L = 12$. Максимальная начальная скорость частиц $V_{\max} = 1$, шаг по времени $\Delta t = 0,001$ (все величины выражены

в модельных единицах). Для этой системы частиц вычислены кинетическая, потенциальная и полная энергии, температура и давление, а также коэффициент самодиффузии.

Анализируя график, построенный в ходе расчета, убеждаемся, что полная энергия постоянна во всем времени работы программы.

В дальнейшем планируется рассмотреть систему частиц через канонический «NVT-ансамбль» и выполнить расчеты всех необходимых физических параметров. Здесь кроме частиц и объема, постоянной величиной является температура T системы. В данном случае происходят эндо- и экзотермические процессы обмена энергии с термостатом.

Литература

1. Галимзянов Б. Н., Мокшин А. В. Основы моделирования молекулярной динамики: Учебное пособие. – Казань: КФУ, 2016. – 107 с.
2. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике. Часть 1 / Х. Гулд, Я. Тобочник. – М.: Мир, 1990. – 350 с.

А. А. Жулего (ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **Е. А. Дей**, канд. физ.-мат. наук, доцент

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИЙ НА ЯЗЫКЕ JAVASCRIPT

Исследование поведения функций и их графическое представление играет важную роль в области математики, физики, экономики, биологии и т.д. По графику функции можно определить её поведение и различные характеристики.

Не все задачи можно решить алгебраическим или аналитическим способом, часто решение задачи можно представить только в виде графика. Если построение элементарных функций не вызывает проблем, то строить графики функций со сложным рисунком очень проблематично.

Для этого была разработана компьютерная программа на языке JavaScript [1, 2].

Программа представляет собой веб-страницу (рисунок 1), на ней мы видим оси X и Y (выделены жирным цветом), сетки квадратов по Ox и Oy для удобства изучения функции и плавающее окно (рисунок 2).