

$$\begin{aligned} \chi_{ijk}^{(2)} = & \chi_1^{(2)} n_i n_j n_k + \chi_2^{(2)} n_i \delta_{jk} + \chi_3^{(2)} n_j \delta_{ki} + \chi_4^{(2)} n_k \delta_{ij} + \\ & + \chi_5^{(2)} n_m n_i \varepsilon_{mjk} + \chi_6^{(2)} n_m n_k \varepsilon_{ijm} + \chi_7^{(2)} n_m n_j \varepsilon_{imk}, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $n_i$  – компоненты вектора  $\mathbf{n}$ , перпендикулярного элементу поверхности сферы,  $\delta_{ij}$  – дельта-символ Кронекера,  $\varepsilon_{ijk}$  – символ Леви-Чивита,  $\chi_i^{(2)}$  – значения независимых коэффициентов тензора  $\chi_{ijk}^{(2)}$ .

**Заключение.** В работе предложена модель генерации суммарной частоты в поверхностном слое диэлектрической сферической частицы с использованием приближения ВКБ. На основе описанной модели с использованием численного интегрирования можно определить напряжённость электрического поля генерируемого излучения и другие его характеристики.

### Литература

1. Шамына, А. А. Генерация суммарной частоты от тонкого цилиндрического слоя / А. А. Шамына, В. Н. Капшай // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 124, № 1. – С. 105–121.
2. Шамына, А. А. Генерация суммарной частоты от тонкого сферического слоя. I. Аналитическое решение / А. А. Шамына, В. Н. Капшай // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 124, № 6. – С. 795–803.
3. Капшай, В. Н. Генерация суммарной частоты от тонкого сферического слоя. II. Анализ решения / В. Н. Капшай, А. А. Шамына // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 125, № 1. – С. 71–78.

**Д. А. Горицкая**

(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)

Науч. рук. **Е. А. Дей**, канд. физ.-мат. наук, доцент

### РЕАЛИЗАЦИЯ ТРЕХМЕРНОГО МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

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 обозначают как метод молекулярной динамики (МД).

Для описания движения структурных частиц в этом методе применяется классическая механика, при этом силы межчастичного взаимодействия задаются модельным потенциалом взаимодействия. В методе МД моделируется движение для каждой частицы, и по результатам моделирования вычисляются физические параметры всей системы. Все параметры выражены в безразмерных единицах. [1, 2]

Для реализации метода молекулярной динамики в трехмерной постановке задачи была разработана компьютерная программа на языке C# с подключением библиотеки OpenGL [3].

Разработанная программа включает в себя следующие компоненты:

- Компонент `openGLControl`, на котором происходит визуализация системы частиц;
- Область ввода начальных значений и параметров системы;
- Область вывода результатов, полученных в ходе работы программы;
- Компонент `Chart`, отображающий график зависимости кинетической, потенциальной и общей энергии системы частиц от числа расчетных шагов программы.

Рассмотреть вид моделирующей программы можно на рисунке 1.

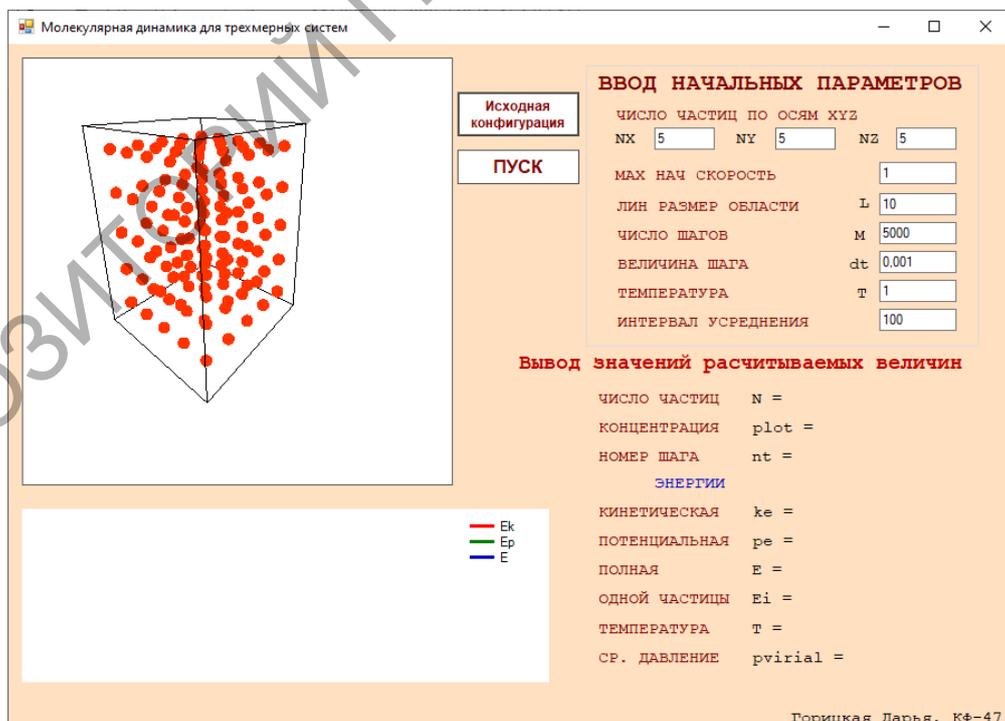


Рисунок 1 – Задание исходной конфигурации для системы  $N = 125$  частиц

Алгоритм реализации метода МД содержит следующие этапы:

1. Задается исходная конфигурация системы частиц (число частиц, размер линейной области, количество расчетных шагов и т. д.);
2. Применяются периодические граничные условия. Таким образом, число частиц в нашей системе сохраняется;
3. Происходит интегрирование уравнений движения на временном шаге  $\Delta t$  через скоростной алгоритм Верле. Координаты и скорости движения частиц вычисляются по следующим 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 (температура, давление, потенциальная и кинетическая энергии и т. д.);

6. Строится новое изображение на компоненте `openGLControl`, на котором частицы имеют уже новые координаты.

В методе молекулярной динамики необходимо, чтобы полная энергия системы частиц оставалась постоянной, так как наша система изолирована. Для этого нужно проверить график зависимости кинетической и потенциальной энергий от времени.

Рассмотрим график для системы, изображенной на рисунке 2. Как видим, зависимость имеет правильный вид.

В последующем планируется добавить расчет некоторых физических величин для системы частиц и рассмотреть систему через канонический «NVT-ансамбль». В этот случае происходят эндо- и экзотермические процессы обмена энергии уже с термостатом.

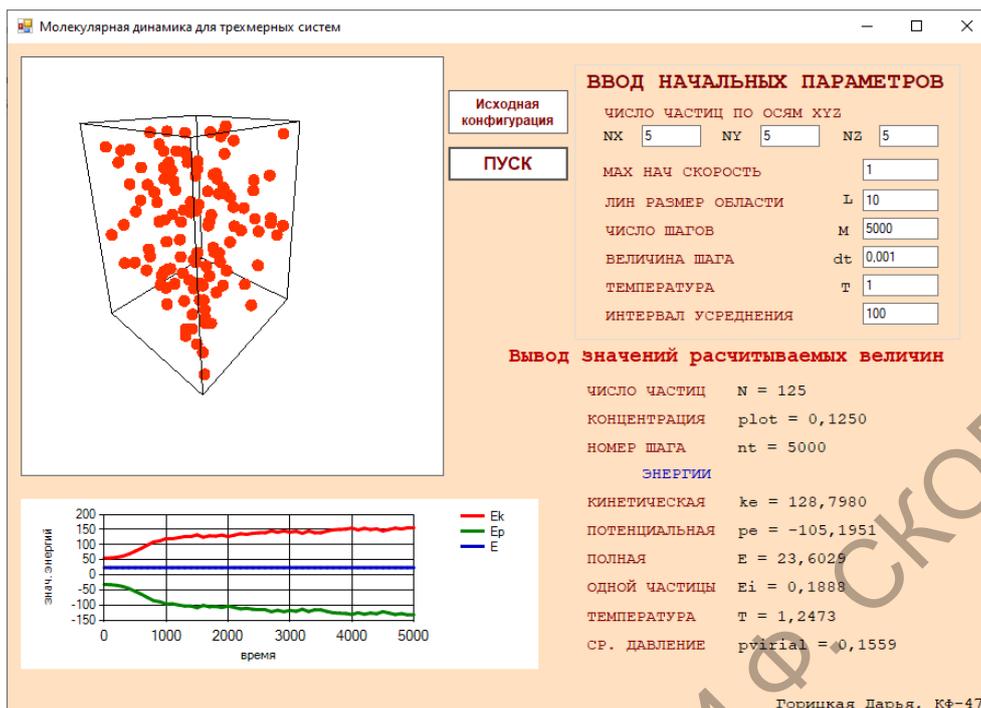


Рисунок 2 – Результат работы моделирующей программы

## 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.
3. Баяковский Ю. М., Игнатенко А. В. Начальный курс OpenGL. М.: Планета знаний, 2007. – 221 с.

**А. А. Гришечкина**

(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)

Науч. рук. **В. Н. Капшай**, канд. физ.-мат. наук, доцент

### **ПАРЦИАЛЬНЫЕ ДВУХЧАСТИЧНЫЕ УРАВНЕНИЯ В РЕЛЯТИВИСТСКОМ КОНФИГУРАЦИОННОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ В СЛУЧАЕ ЕДИНИЧНОГО ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТА ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА « $\delta$ -СФЕРА»**

Рассмотрим уравнение для парциальных волновых функций  $\psi_{(j)}(r)$  в релятивистском конфигурационном представлении, описы-