

Рис.5. Блок-схема устройства

### Литература

1. Интернет-адрес: [www.life.com.by](http://www.life.com.by).
2. Интернет-адрес: [www.moxa.ru](http://www.moxa.ru).
3. Ан П. Сопряжение ПК с внешними устройствами. / Пер. с англ. М., 2001.

## РЕАЛИЗАЦИЯ ПРОГРАММЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ СИСТЕМЫ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

А. С. Васильчук, Н. В. Ванюшева, А. Н. Шумский

### ВВЕДЕНИЕ

Метод молекулярной динамики позволяет моделировать динамическое поведение жидких, газообразных и жидкокристаллических сред. В литературе приведены различные варианты программной реализации этого метода для одноатомных молекул на языках Fortran, Pascal [2] и C [1]. Характерные особенности указанных реализаций – консольный ввод/вывод данных и отсутствие визуализации.

В данной работе рассмотрены разработанные программные средства моделирования, позволяющие задавать конфигурацию молекул и моделировать систему многоатомных молекул с возможностью визуализации.

### РАЗВИТИЕ СТАНДАРТНОГО АЛГОРИТМА

В основе метода молекулярной динамики лежит численное решение уравнений Ньютона для взаимодействующих частиц. Посредством по-

тенциала взаимодействия Леннарда-Джонса можно описывать динамику системы, состоящей из молекул, имеющих форму шариков. При этом сила взаимодействия между частицами зависит только от расстояния между ними. Для получения более точной оценки макроскопических параметров системы используются периодические краевые условия, а для интегрирования уравнений движения обычно применяют алгоритм Верле в скоростной форме [1–3].

Моделирование с использованием стандартного алгоритма указывает на его критичность к выбору шага времени, причем его уменьшение ведет к росту вычислительных затрат, а увеличение – к падению точности вплоть до расходимости алгоритма вследствие возможности приобретения слишком высоких скоростей при очень малых расстояниях между сталкивающимися молекулами. Эта проблема частично решается путем программной проверки и ограничения диапазона вводимых параметров [5]. В качестве альтернативного варианта решения указанной проблемы рассмотрена возможность автоматического уменьшения шага дискретизации. При этом в случае превышения пути, пройденного атомом за установленный шаг времени  $\Delta T$  некоторое критического расстояния  $\Delta r$  (задаётся пользователем), шаг времени итеративно уменьшается, пока проходимый путь не окажется в заданных рамках. В результате новый шаг времени отвечает условию  $\Delta t < \Delta T$ , а для молекулы превысившей лимит перемещения проводится  $n = \Delta T / \Delta t$  циклов вычисления параметров, и только потом алгоритм переходит к следующему атому. Таким образом, уменьшение шага времени происходит только там, где это необходимо, что позволяет повысить общую эффективность вычислений.

## СИСТЕМА МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

Расширяя метод на более сложные системы, содержащие молекулы разных типов, при разработке алгоритма предусмотрена возможность задания произвольных значений параметров потенциала Леннарда-Джонса и выбора массы каждой молекулы, что позволит моделировать динамику многофазных сред.

Существуют различные способы построения модели для молекул, имеющих неоднородные атомы и различную форму: многоатомное моделирование, использование потенциалов зависящих от ориентации между молекулами и др. [3]. В данной работе использован наиболее простой из указанных способов. В отличие от одноатомной модели, где каждая молекула состоит только из атомов одного типа, имеющих одинаковые потенциалы взаимодействия, в многоатомном газе каждая молекула может состоять из произвольного числа атомов с произвольными параметрами, поэтому на каждый атом действует две результирующие силы:

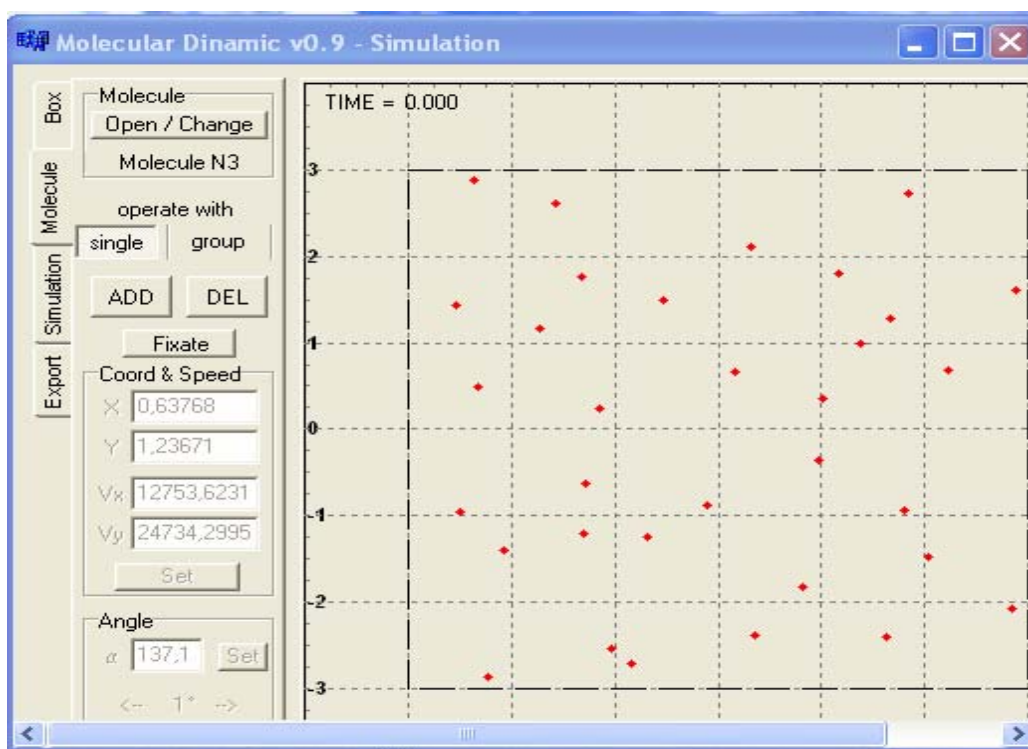


Рис. 1. Окно пользовательского интерфейса программы

- внутренняя со стороны других атомов входящих в молекулу,
- внешняя со стороны атомов других молекул.

Первая сила отвечает за целостность молекулы, вторая – за межмолекулярное взаимодействие. Внутренняя сила реализована как степенная функция от смещения атома от нормального положения относительно другого. Т.е. каждый моделируемый атом молекулы кроме информации о потенциале, массе, координатах, скоростях и ускорении, так же содержит список расстояний до каждого атома своей молекулы, а внутренняя сила стремится поддерживать это расстояние.

Молекулы представлены как объединение атомов, и не содержат никакой информации о своём состоянии. Все необходимые параметры (координаты центра масс, поступательная скорость, угол поворота) вычисляются из текущих характеристик атомов. Таким образом, обычная система одноатомных молекул развивается путем введения сил связи атомов и объединением атомов в молекулы.

Для расширения спектра применимости разрабатываемого программного средства добавлена возможность задания абсолютно произвольного потенциала внешнего взаимодействия. Это реализовано через распознавание и вычисление строковой переменной, содержащей формулу внешнего потенциала. Постоянное распознавание на каждом шаге алгоритма Верле значительно снижает скорость симуляции, однако позволяет экспериментировать с потенциалами, отличающихся от ранее применявшихся.

## ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА

С учетом особенностей, рассмотренных выше, на языке C++ разработана программа конструирования молекул и программа моделирования с визуализацией (рис. 1), использующая специально созданный класс. Этот класс, наряду отмеченными возможностями, может быть расширен введением потенциала электромагнитного взаимодействия и заряда атома, а также добавлением возможности задать внешнее потенциальное поле путем введения различных вариантов граничных условий.

### Литература

1. Гулд Х., Табочник Я., Компьютерное моделирование в физике. М., 1990.
2. Rapaport D.C., The art of molecular dynamics simulation. Cambridge, 2004.
3. Лисица Е.В. Особенности реализации метода молекулярной динамики // Тез. докл. XVI Респ. науч. конф. асп., маг. и студ. «Физика конденсированного состояния», 23 – 25 апреля 2008 г. Гродно, Республика Беларусь. С 69 – 70.
4. Лисица Е.В. Моделирование идеальной жидкости методом молекулярной динамики // Сб. работ 65-й науч. конф. студ. и асп. БГУ. В 3 ч. Ч. 1. Минск: Изд. Цент БГУ, 2008. С176–179.
5. Жишко Ю.П., Асташкин А.В., Лисица Е.В., Лутковский В.М. Программные средства для реализации метода молекулярной динамики // Сб. работ 66-й научной конференции студентов и аспирантов БГУ. В 3 ч. Ч. 1. Минск: Изд. Цент БГУ, 2010. С.202–205.

## ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКРИСТАЛЛОВ InAs И GaSb В ИОННОИМПЛАНТИРОВАННОМ КРЕМНИИ

**Ф. Ф. Комаров, Л. А. Власукова, О. В. Мильчанин,  
М. В. Гребень, О. В. Бабаченок, М. А. Моховиков**

### ВВЕДЕНИЕ

В настоящий момент наблюдается интенсивный рост спроса на рынке оборудования для волоконно-оптических линий связи (ВОЛС). Преимущества использования в ВОЛС окон прозрачности вблизи длин волн 1.3 мкм и 1.55 мкм обуславливают необходимость создания эффективных и недорогих источников и усилителей когерентного излучения диапазона 1.3–1.55 мкм. Сейчас в качестве излучателей в этом диапазоне длин волн используются главным образом лазеры на основе InGaAsP/InP, которые имеют ряд существенных недостатков, такие как: трудности при создании вертикально-излучающих лазеров, высокая стоимость и др.. В данной работе предложен метод синтеза прямозонных полупроводников  $A^3B^5$  в кристаллической матрице кремния [1]. Наблюдаемая полоса в спектрах фото-