

有限温度下线性谐振子晶格的 分子动力学模拟*

刘白伊邴, 唐少强

(北京大学 应用物理与技术研究中心; 北京大学 工学院, 北京 100871)

摘要: 基于双向界面条件和声子热浴,提出了一种新的热流输入方法,该方法未引入任何耗散因子或经验参数,能在局域的空间和时间上实现有限温度下的原子模拟.对于一维线性谐振子晶格,采用双向界面条件作为系统的边界,目的是为了让热能能从外界输入系统,同时允许内部的波动自由地传出,从而实现系统中能量的动态平衡.通过数值计算发现,双向界面条件能让正方向的波完整地输入,同时还能抑制反方向的波的输入,因此,边界条件可以起到行波的二极管的作用,声子热浴的正则模态能很好地描述原子的热振动,通过推导可将正则模态分解为正方向和反方向的输入波,取正方向的波来构造热源项.数值算例表明,热流输入方法对于线性谐振子链非常有效,系统能快速地达到预期的温度,并且能够维持在稳定的状态,同时,还能很好地处理有限温度下的非热运动.

关键词: 热流输入; 有限温度; 原子模拟; 谐振子晶格

中图分类号: O39 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2015.01.005

引言

分子动力学方法广泛应用于材料科学和材料工程,是模拟原子运动的重要方法.由于实际晶体的原子数目非常巨大,以目前计算机的计算能力,不可能对每个原子进行长时间的模拟.近年来,多尺度方法的不断发展,解决了许多困难^[1],为实现大规模的晶体模拟提供了可能.然而,研究发现目前大多数多尺度方法都是在零温度下模拟,除了少数几个例子^[2-4].我们都知道温度对材料的影响非常大^[5],因此,在有限温度下进行分子动力学模拟才能更准确地描述材料的性质.

考虑一个非常大的晶格,利用多尺度方法分析,从完整的晶格中提取一块子系统,如图1所示,黑色的圆点代表子系统的原子,灰色的圆点代表边界原子,晶格边界以外的区域为无限大的热源.本文的目的是用有限的子系统来模拟无限大的晶格,仅对子系统采用分子动力学模拟.考虑到原子间的相互作用,只有边界原子的运动方程不能完整地写出,因此需要对边界原子的运动方程重新构造.

* 收稿日期: 2014-09-24; 修订日期: 2014-11-02

基金项目: 国家自然科学基金(11272009)

作者简介: 刘白伊邴(1991—),女,四川人,博士生(E-mail: lbyili@pku.edu.cn);

唐少强(1970—),男,江苏南通人,教授(通讯作者. E-mail: maotang@pku.edu.cn).

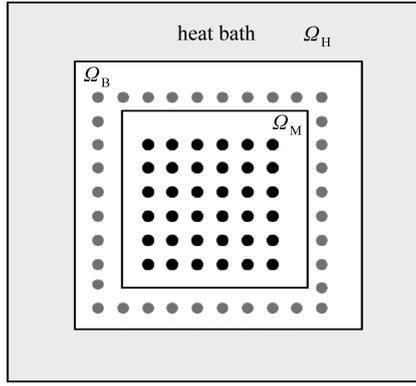


图 1 原子晶格模拟示意图

Fig. 1 The schematic plot of an atomic lattice

有限温度模拟的动力学包括两个部分,一部分是完整晶格在零温度下的非热运动,考虑特例,所有原子初始都处于平衡位置.为了真实地再现子系统的动力学,边界原子需要使用无反射边界条件,比如匹配边界条件.此外,还有其它许多方法处理零温度下的非热运动,但边界条件使用的是精确或近似边界条件.另一部分是系统在预定温度下的热振动.整个晶格在初始时为热力学平衡态,子系统的温度受环境或热浴的影响,如果把热浴撤走,子系统的温度将会下降到 0 度.目前,有许多方法可以实现系统在预定温度下的热振动^[6],比如, Berendsen 速度标度恒温方法^[7-8],依据的理论比较粗糙,不属于哪种系综分布; Andersen 恒温扩展方法^[9],引入了随机碰撞,在本质上破坏了经典动力学的决定论性质; Nosé-Hoover 热浴^[10-11]引入了耗散项,改变了动力学方程,在处理非热运动时可能会使温度过分的衰减; Karpov 等的声子热浴方法^[12],边界条件使用的是时间历史积分边界条件,输入的热源为声子的正则模态,在该方法中,边界条件计算量很大,同时对积分核函数的截断,会存在比较大的数值误差.

目前这些热浴方法存在一定的局限性,笔者希望构造一种新的热浴方法,不引入任何耗散因子和经验参数,能够真实高效地再现原子热振动,实现热流从系统的边界输入,并且能够处理有限温度下原子的非热运动,比如位错、裂纹扩展.在构造一种新的热浴方法的时候,需要解决两个核心问题.首先是边界条件的选择,选择双向界面条件作为系统的边界,因为通常的边界条件,如周期边界条件、固定边界条件、无反射边界条件等,都无法实现热流从边界的输入.双向界面条件能让热流从外界输入系统,同时允许内部的波动自由地传出,从而实现系统中能量的动态平衡.其次是热源的选择,选择声子热浴中的正则模态作为热源,因为声子的正则模态能很好地再现原子的热振动,同时还能和双向界面条件很好地匹配.因此,本文在双向界面条件和声子热浴的基础上提出了新的热浴方法,称作热流输入方法.

本文采用热流输入方法,对线性谐振子链进行有限温度下的模拟.首先,推导匹配边界条件,对边界的反射系数进行分析.再在匹配边界条件的基础上进一步推导双向界面条件,并求解正方向的波源和反方向的波源透过边界的精确解.然后,依据声子热浴的方法,构造适合双向界面条件的热源.最后,模拟一维谐振子晶格在预定温度下的热振动,包括平衡态和稳定的非平衡态的热振动,并通过数值算例说明热流输入方法能够很好地处理有限温度下的原子的非热运动.

1 线性谐振子链的动力学方程

研究线性谐振子链,只考虑最近邻相互作用,原子间的相互作用势为 $V(u_{n+1} - u_n) = k(u_{n+1}^2$

$-u_n^2)/2$, 谐振子的 Newton(牛顿)方程为

$$m\ddot{u}_n = k(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}), \quad (1)$$

其中, u_n 是第 n 个原子离开平衡位置的位移, k 是弹性系数. 选择晶格常数 h_a 对长度进行无量纲化, 选择 $\sqrt{m/k}$ 对时间无量纲化, 无量纲方程写为

$$\ddot{u}_n = u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}. \quad (2)$$

模拟的原子区域编号从 1 到 N , 原子编号 1 为左端边界原子, N 为右端边界原子. 构造左端原子的二阶 Newton-Taylor 型匹配边界条件^[13], 在波数为 0 和 $\pi/2$ 处匹配. 选择波数为 0 处匹配是为了吸收携带大部分能量的低频长波, 同时还选择在波数 $\pi/2$ 处匹配是为了吸收原子热振动产生的高频短波. 通过推导得到左端原子的匹配边界条件为

$$\dot{u}_1 = -c_1\dot{u}_2 - \dot{u}_3 + c_2(u_3 - u_1), \quad (3)$$

系数 $c_1 = 2 + 2\sqrt{2}$, $c_2 = 2 + \sqrt{2}$, 用同样的方法可以得到右端边界条件. 假设原子链的通解为 $u_n(t) = e^{i(\omega t + \xi n)} + Re^{i(\omega t - \xi n)}$, 将通解代入式(3), 求解得到反射系数:

$$R(\xi) = -\frac{i\omega(e^{i\xi} + c_1e^{i2\xi} + e^{i3\xi}) + c_2(e^{i\xi} - e^{i3\xi})}{i\omega(e^{-i\xi} + c_1e^{-i2\xi} + e^{-i3\xi}) + c_2(e^{-i\xi} - e^{-i3\xi})}, \quad (4)$$

其中, ξ 是波数, $\omega = 2\sin(\xi/2)$ 是频率. 当左行波传播到左端边界的时候, 分成了两部分, 一部分为透射波, 另一部分为反射波, $R(\xi)$ 代表波数为 ξ 的反射波的振幅. 反射系数如图 2 所示. 边界条件能够很好地抑制反射, 特别是波数在 $[0, \pi/2]$ 的波, 反射系数几乎为 0, 其它波数的反射系数都小于 1, 这说明边界条件能够非常好地吸收中低频波, 同时还能吸收大部分高频波.

模拟的子系统与热源接触, 热源通过边界不断向子系统输入热量. 假设整个晶格的右行波形式为 $w_l(t)$, 左行波形式为 $v_l(t)$, 根据波的分解叠加性质, 任何一点处的波可以分解成右行波和左行波的叠加:

$$u_l = w_l + v_l, \quad \dot{u}_l = \dot{w}_l + \dot{v}_l, \quad l \in [1, N]. \quad (5)$$

左行波 v_l 能够被左端边界条件吸收

$$\dot{v}_1 = -c_1\dot{v}_2 - \dot{v}_3 + c_2(v_3 - v_1), \quad (6)$$

再用 u 和 w 的信息来替代 v ^[14],

$$\begin{aligned} \dot{u}_1 &= \dot{w}_1 + \dot{v}_1 = \dot{w}_1 - c_1\dot{v}_2 - \dot{v}_3 + c_2(v_3 - v_1) = \\ &= \dot{w}_1 - c_1(\dot{u}_2 - \dot{w}_2) - (\dot{u}_3 - \dot{w}_3) + c_2(u_3 - w_3) - c_2(u_1 - w_1), \end{aligned} \quad (7)$$

将上式整理成两部分, 一部分为原子的运动, 另一部分为热源的输入. 因此, 含有热源项的左端双向界面条件为

$$\dot{u}_1 = -c_1\dot{u}_2 - \dot{u}_3 + c_2(u_3 - u_1) + f(t), \quad (8)$$

$$f(t) = \dot{w}_1 + c_1\dot{w}_2 + \dot{w}_3 - c_2(w_3 - w_1). \quad (9)$$

利用同样的方法可以得到右端双向界面条件. 如果原子的初值与输入的热源 $f(t)$ 完全一

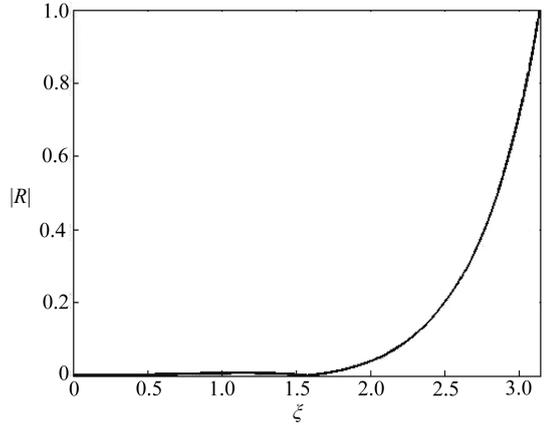


图 2 谐振子链匹配边界条件的反射系数

Fig. 2 The reflection coefficient of matching boundary condition for a harmonic chain

致, $u_l(0) = w_l(0)$, $\dot{u}_l(0) = \dot{w}_l(0)$, 那么 $u_l(t) = w_l(t)$, 入射波可以精确地传入原子区域. 然而, 如果原子区域有附加的运动, 初始的传播为 $v_l(0) = u_l(0) - w_l(0)$, $\dot{v}_l(0) = \dot{u}_l(0) - \dot{w}_l(0)$, 入射波与原子位移的振动可能存在相位差 $v_l(t) = u_l(t) - w_l(t)$. 因此, 通过子系统的初始值, 可以精确地分析出波的传播.

如果波源项 $f(t)$ 不完全是正方向的输入波, 而是含有反方向的波, 考虑一个左行波 $v_l(t) = e^{i(\omega t + \xi l)}$, 左端边界的波源 $f(t) = \dot{v}_1 + c_1 \dot{v}_2 + \dot{v}_3 - c_2(v_3 - v_1)$. 假设 Newton 方程的通解为 $u_n(t) = Ae^{i(\omega t + \xi n)} + Be^{i(\omega t - \xi n)}$, 左端边界条件含有热源项, 而右端边界条件不含热源项,

$$\dot{u}_1 = -c_1 \dot{u}_2 - \dot{u}_3 + c_2(u_3 - u_1) + f(t), \quad \dot{u}_N = -c_1 \dot{u}_{N-1} - \dot{u}_{N-2} + c_2(u_{N-2} - u_N). \quad (10)$$

将 $u_n(t)$ 和 $f(t)$ 代入式(10)中, 考虑原子链为半无穷链, 右端边界反射可以忽略, 通过计算得到的解为

$$u_n(t) = \frac{i\omega(e^{i\xi} + c_1 e^{i2\xi} + e^{i3\xi}) + c_2(e^{i\xi} - e^{i3\xi})}{i\omega(e^{-i\xi} + c_1 e^{-i2\xi} + e^{-i3\xi}) + c_2(e^{-i\xi} - e^{-i3\xi})} e^{i(\omega t - \xi n)} = -R(\xi) e^{i(\omega t - \xi n)}. \quad (11)$$

输入波的振幅为反射系数的负值, 说明反方向的波有很小一部分能透过边界条件输入系统. 结果表明双向界面条件可以完全透过正方向的波, 同时能够抑制反方向的波, 双向界面条件只允许热流的单向通过, 因此, 可以将双向界面条件看成行波的二极管.

2 声子热源的构造

对于谐振子链, 热振动的精确解可表示为在有限温度 T 下各种频率的正则模态(声子)的叠加^[12,15]. 下面, 设计一个合适的热源

$$u_n(t) = \sum_p [a_p^+ \cos(\omega_p t + \phi_p^+) \cos(\xi_p n) + a_p^- \cos(\omega_p t + \phi_p^-) \sin(\xi_p n)], \quad (12)$$

其中, p 为正整数, 取值范围为 $[N/16, 7N/16]$, 波数 $\xi_p = 2\pi p/N$, 取值范围为 $[\pi/8, 7\pi/8]$, 间隔为 $2\pi/N$, ϕ_p^\pm 是 $[0, 2\pi]$ 范围内的随机相位, $\omega_p = 2\sin(\xi_p/2)$ 是频率, 正则模态总数为 $N_c = 3N/8 + 1$, 振幅满足 Gibbs(吉布斯)分布:

$$\langle (a_p^\pm)^2 \rangle = \frac{2T_\pm}{N_c \omega_p^2}. \quad (13)$$

这里, 选择 kh_a^2/k_B 对温度进行无量纲化, 温度 T_\pm 为无量纲数, Boltzmann(玻尔兹曼)常数 $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K.

经过一系列的计算, 我们发现正则模态解可分解为左行波和右行波, 右行波成分为

$$w_n = \sum_p \tilde{a}_p \cos(\omega_p t - \xi_p n + \varphi_p), \quad (14)$$

$$\langle \tilde{a}_p^2 \rangle = \frac{1}{4} ((a_p^+)^2 + (a_p^-)^2 + 2a_p^+ a_p^- \sin(\phi_p^+ - \phi_p^-)) = \frac{T}{N_c \omega_p^2}, \quad (15)$$

$$\varphi_p = \arctan \frac{a_p^+ \sin(\phi_p^+) + a_p^- \cos(\phi_p^-)}{a_p^+ \cos(\phi_p^+) - a_p^- \sin(\phi_p^-)}. \quad (16)$$

由于 ϕ_p^\pm 是 $[0, 2\pi]$ 范围内的随机相位, 可以得到 φ_p 也是 $[0, 2\pi]$ 范围内的随机相位. 在模拟的时候, 正则模态的振幅取为 $\tilde{a}_p = \sqrt{T/(N_c \omega_p^2)}$.

总之, 如果左右两端热流温度分别为 T_L 和 T_R , 系统的运动方程组如下:

$$\ddot{u}_n = u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}, \quad n = 2, 3, \dots, N-1, \quad (17)$$

$$\dot{u}_1 = -c_1 \dot{u}_2 - \dot{u}_3 + c_2(u_3 - u_1) + f_L(t), \quad (18)$$

$$\dot{u}_N = -c_1 \dot{u}_{N-1} - \dot{u}_{N-2} + c_2(u_{N-2} - u_N) + f_R(t), \quad (19)$$

$$f_L(t) = \dot{w}_1 + c_1 \dot{w}_2 + \dot{w}_3 - c_2(w_3 - w_1), \quad (20)$$

$$f_R(t) = \dot{v}_N + c_1 \dot{v}_{N-1} + \dot{v}_{N-2} - c_2(v_{N-2} - v_N), \quad (21)$$

$$w_l = \sum_p \sqrt{\frac{T_L}{N_c \omega_p^2}} \cos(\omega_p t - \xi_p l + \varphi_p^L), \quad (22)$$

$$v_l = \sum_p \sqrt{\frac{T_R}{N_c \omega_p^2}} \cos(\omega_p t + \xi_p l + \varphi_p^R). \quad (23)$$

3 数值算例

采用二阶精度的 Runge-Kutta 算法求解运动方程,模拟的区域共有 $N = 200$ 个原子,时间步长取为 $\Delta t = 0.01$,总的计算时间 $t = 6\,000$,截断时间 $t_c = 1\,000$.

首先,测试最基本的热输入过程,如图 3 所示.两端热流温度相同 $T_L = T_R = 3$,初始所有原子都静止在平衡位置.从图 3(a)中可以看到,系统温度

$$T = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \dot{u}_n^2(t)$$

由 0 逐渐升高,大约在 $t = 200$ 时,系统温度升到 $T = 3$,系统温度很快达到稳态温度.同时,通过图 3(b)观察到每个原子的动力学温度

$$T_n = \frac{1}{5\,000} \int_{1\,000}^{6\,000} \dot{u}_n^2(t) dt$$

在 $T = 3$ 附近有很小的波动,并且发现动力学温度的分布具有随机性.此外,笔者计算了原子热流随时间的积分

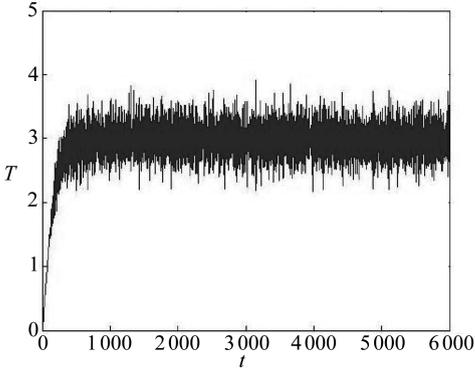
$$J_n(t) = \int_0^t \dot{u}_{n+1}(u_{n+1} - u_n) dt,$$

选取左右两端和中间的原子观察热流,原子序号分别为 $n = 3, 100, 198$,如图 3(c)所示.发现 $J_3(t)$ 由 0 逐渐下降,大约在 $t = 200$ 时下降到 -300 ,下降过程中有净热流从左往右流入子系统,随后在 -300 附近振荡,说明热流达到平衡. $J_{198}(t)$ 曲线变化趋势与 $J_3(t)$ 正好相反,由 0 逐渐上升到 300,上升过程中有净热流从右往左流入子系统.对于 $J_{100}(t)$ 在 $t = 100$ 以前始终为 0,这是因为从两端输入的热流还没达到子区域的中心,在 $t = 100$ 以后, $J_{100}(t)$ 在 0 附近振荡,说明两个方向输入的热流达到了动力学平衡,系统达到了稳定的状态.

接下来模拟两端加不同温度的情形,左右两端温度分别为 $T_L = 5, T_R = 1$,如图 4(a)所示.系统温度由 0 逐渐升高到 $T = 3$,很快达到稳态温度,稳态温度为两端温度的平均值 $T = (T_L + T_R)/2$.动力学温度在 $T = 3$ 附近有很小的波动,如图 4(b),与之前的情形类似.然而,这两种情况热流的积分曲线完全不同,从图 4(c)中观察到,热流逐渐下降,最下方的曲线为左端原子热流,最上方的曲线为右端原子热流.左端热流比右端热流的值更小,这是由于两端温度不同造成的,热流值呈下降趋势说明始终有净的热流从左往右流向子区域.虽然两种情形的系统温度都为 $T = 3$,但是系统的状态完全不同,前者系统的热流保持平衡,而后者始终有稳定的净热流.

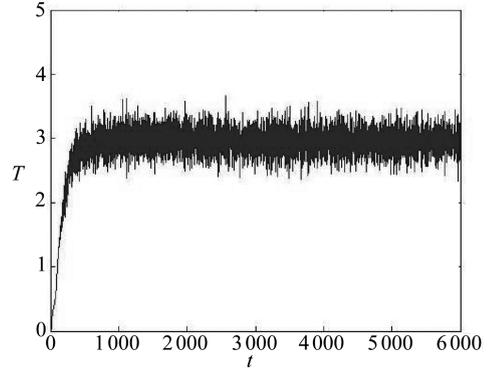
最后,在原子链上进行有限温度的非热运动的模拟.首先给予系统两端加相同温度的热流,将子系统加热到温度 $T = 3$,体系达到平衡态后,在 $t = 2\,000$ 时,给原子热振动的位移上叠加一个 Gauss(高斯)波包 $\tilde{u}_n = 50e^{-0.005(n-100)^2}$,此时原子的位移变为 $u_n + \tilde{u}_n$,如图 5(a)和(b)所示.从图上可以看到附加的平均运动初始位移很大,之后分解为两个波包各自向左右两边传播,波包的波峰为初始值的一半.如图 5(c)和(d),在 $t = 2\,110$ 时波传播到边界,随后整个波包

消失,原子链上没有反射.同时,通过图 6 观察系统温度的变化,在 $t = 2\,000$ 之前,系统温度逐渐升高到稳态温度,随后附加运动引起系统温度增加,当 $t = 2\,150$ 时波包完全传出原子链,系统又恢复到平衡态.



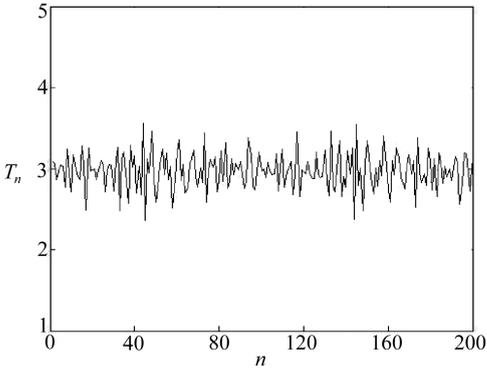
(a) 系统温度

(a) The system temperature



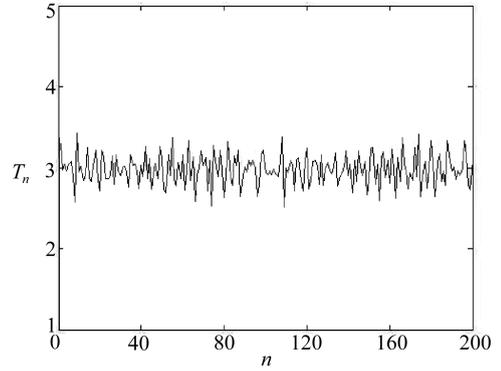
(a) 系统温度

(a) The system temperature



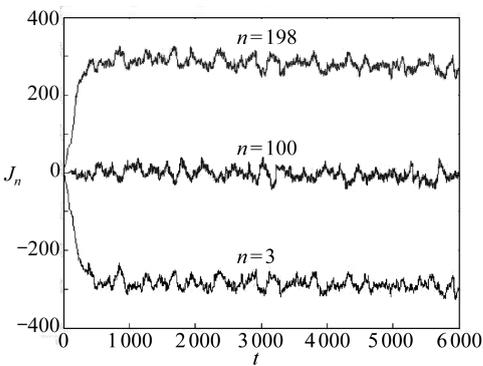
(b) 动力学温度

(b) The kinetic temperature



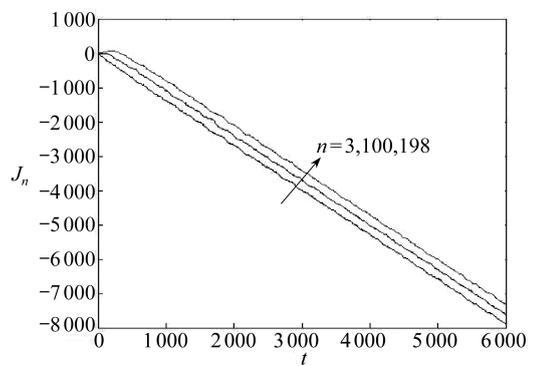
(b) 动力学温度

(b) The kinetic temperature



(c) 热流的时间积分

(c) Time integral of the heat flux

图 3 加热过程 $T_L = T_R = 3$ Fig. 3 The heating process for $T_L = T_R = 3$ 

(c) 热流的时间积分

(c) Time integral of the heat flux

图 4 加热过程 $T_L = 5, T_R = 1$ Fig. 4 The heating process for $T_L = 5, T_R = 1$

在这个过程中,与 Nosé-Hoover 热浴方法^[11]进行比较

$$\ddot{u}_n = u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1} - \zeta \dot{u}_n, \quad n = 2, 3, \dots, N-1,$$

$$\zeta = \frac{1}{Q} \left(\sum_n \dot{u}_n^2 - NT \right), \quad u_0 = 0, u_N = 0.$$

系统温度为 $T = 3$, 参数 Q 取为 200, 初始速度为 0 到 0.01 之间的随机数, 耗散项的初值为 $\zeta = 0.1$, 积分格式参数和原子链长的取值与热流输入方法相同. 在 $t = 2000$ 时, 叠加一个相同的 Gauss 波包, Nosé-Hoover 热浴是通过耗散因子和参数 Q 调节温度, 当有附加的平均运动时, 耗散因子能使附加的运动衰减, 衰减的快慢取决于参数 Q . 比较图 5 和图 7, 可以看到图 7 中 Gauss 波包也分成了左行波和右行波向左右两端传播, 但是当波传到边界的时候存在明显的反射, 并且反射波在原子链中来回传播, 需要经过很长时间波包才能衰减掉, 从而无法看到波的正确传播. 同时, 再比较图 6 和图 8, 观察系统温度的变化, 两种方法都能使系统达到预期的温度, 但是在 Nosé-Hoover 热浴中, 增加的附加运动并没有引起系统温度增加, 因此, 不能很好地反映附加运动对系统温度的影响.

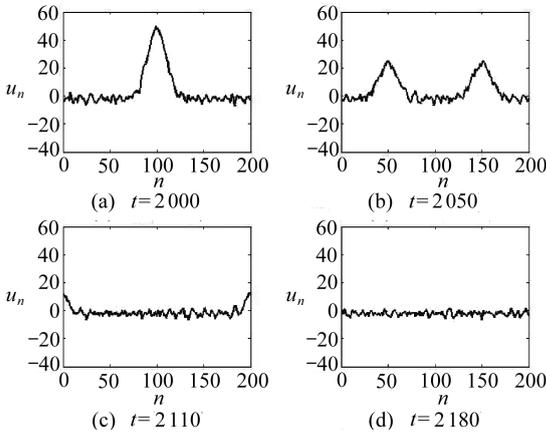


图 5 热流输入方法的有限温度模拟

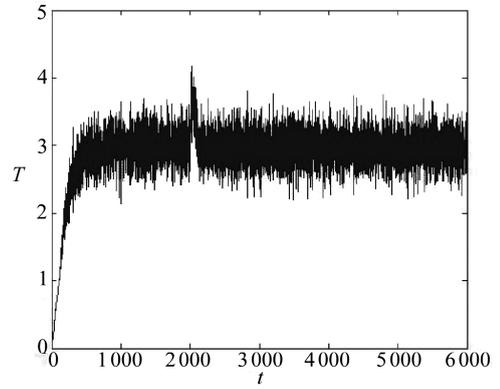


图 6 热流输入方法的系统温度

Fig. 5 Finite temperature simulation of the heat jet approach

Fig. 6 The system temperature for the heat jet approach

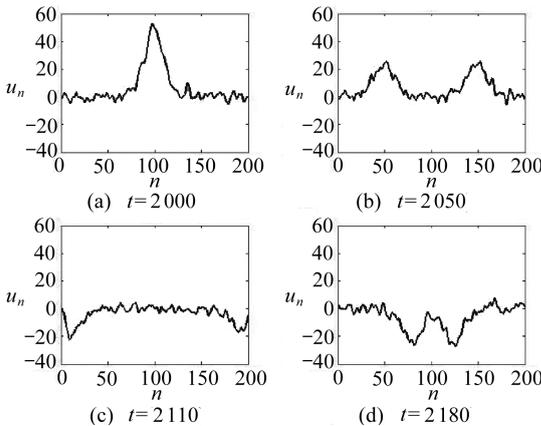


图 7 Nosé-Hoover 热浴的有限温度模拟

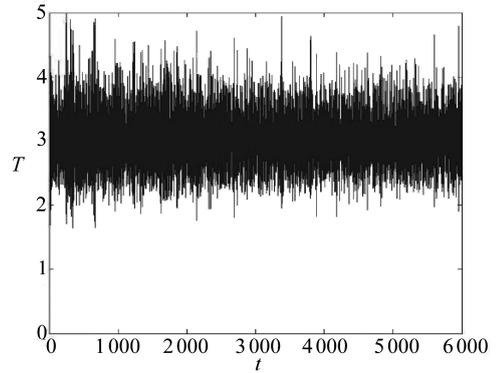


图 8 Nosé-Hoover 热浴的系统温度

Fig. 7 Finite temperature simulation of Nosé-Hoover heat bath Fig. 8 The system temperature for Nosé-Hoover heat bath

4 结果讨论

计算结果表明, 热流输入方法能高效地再现原子的热振动, 实现有限温度下原子的非热运

动的模拟.热流输入方法可以使子系统达到预期的温度,系统的温度为两端热流温度的平均值,并且维持在稳定的状态.对于线性晶格,双向边界条件能有效地过滤正方向的波,抑制反方向的波,这样热源可以完全无阻碍地输入,同时允许非热运动和热振动自由地传出,边界条件起到行波滤波器的作用.在线性链的计算中,计算误差可以严格地与反射系数相联系,通过设计边界条件可以让误差非常小,但是需要同时考虑精度和计算成本,如果边界条件使用更多的原子,就需要使用更高精度的计算格式.此外,输入的热流采用的是正则模态的形式,这避免了因为错误方向的波输入引起的误差.

参考文献(References):

- [1] Liu W K, Karpov E G, Park H S. *Nano Mechanics and Materials: Theory, Multi-Scale Methods and Applications*[M]. John Wiley & Sons, Ltd, 2006.
- [2] Dupuy L M, Tadmor E B, Miller R E, Phillips R. Finite-temperature quasicontinuum: molecular dynamics without all the atoms[J]. *Phys Rev Lett*, 2005, **95**(6): 060202.
- [3] Mathew N, Picu R C, Bloomfield M. Concurrent coupling of atomistic and continuum models at finite temperature[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2011, **200**(5/8): 765-773.
- [4] XIANG Mei-zhen, CUI Jun-zhi, LI Bo-wen, TIAN Xia. Atom-continuum coupled model for thermo-mechanical behavior of materials in micro-nano scales[J]. *Science China: Physics, Mechanics & Astronomy*, 2012, **55**(6): 1125-1137.
- [5] Jiang H, Huang Y, Hwang K C. A finite-temperature continuum theory based on interatomic potentials[J]. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2005, **127**(4): 408-416.
- [6] Lepri S, Livi R, Politi A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices[J]. *Physics Reports*, 2003, **377**(1): 1-80.
- [7] Berendsen H J C, Postma J P M, Van Gunsteren W F, DiNola A, Haak J R. Molecular dynamics with coupling to an external bath[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1984, **81**(8): 3684-3690.
- [8] Bussi G, Parrinello M. Accurate sampling using Langevin dynamics[J]. *Physical Review E*, 2007, **75**: 056707.
- [9] Andersen H C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1980, **72**(4): 2384-2393.
- [10] Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1984, **81**(1): 511-519.
- [11] Hoover W G. Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions[J]. *Physical Review A*, 1985, **31**: 1695.
- [12] Karpov E G, Park H S, Liu W K. A phonon heat bath approach for the atomistic and multi-scale simulation of solids[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2007, **70**(3): 351-378.
- [13] Wang X, Tang S. Matching boundary conditions for lattice dynamics[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2013, **93**(12): 1255-1285.
- [14] TANG Shao-qiang. A two-way interfacial condition for lattice simulations[J]. *Adv Appl Math Mech*, 2010, **2**(1): 45-55.
- [15] Born M, Huang K. *Dynamical Theory of Crystal Lattices*[M]. Oxford: Clarendon, 1954.

Molecular Dynamics Simulation of Linear Harmonic Lattices at Finite Temperature

LIU Bai-yi-li, TANG Shao-qiang

(*CAPT of Peking University; College of Engineering,
Peking University, Beijing 100871, P.R.China*)

Abstract: A heat jet approach for atomic simulation at finite temperature in both local space and time was proposed based on the 2-way boundary condition and phonon heat bath, without any dissipation factor and empirical parameter introduced. A subsystem was extracted from a space lattice for analysis of the exact molecular dynamics lest the entire lattice was to be solved numerically. For an extracted linear harmonic chain, the 2-way boundary condition allowed effective incoming waves fully enter the subsystem, and meanwhile, non-thermal motion and thermal fluctuation propagate freely out of the subsystem, to realize dynamic equilibrium of the system energy. During numerical calculation, the 2-way boundary condition worked like a wave diode which let in the positive-going waves while keeping out the negative-going ones. The normal mode of phonon heat bath well described the atomic heat vibration, then it was decoupled into positive-going and negative-going input waves of which the former was used to build the heat source term. For the molecular dynamics simulation of linear harmonic chains, the numerical tests demonstrate effectiveness of the proposed heat jet approach, which makes the chain rapidly reach the expectant temperature, keeps it in a steady state thereafter, and reasonably depicted the additional non-thermal atomic motion at finite temperature.

Key words: heat jet; finite temperature; atomic simulation; harmonic lattice

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China(11272009)