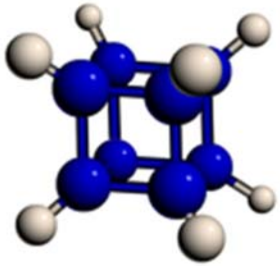
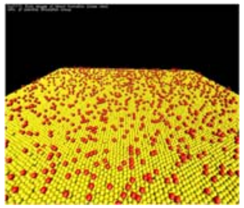
Τεχνικές προσομοίωσης και σχεδιασμού υλικών σε ΗΥ

Εισαγωγικές έννοιες

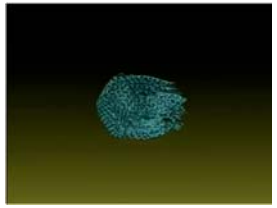


Δ.Γ. Παπαγεωργίου

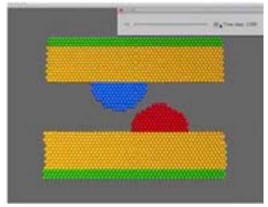
Μερικές εφαρμογές



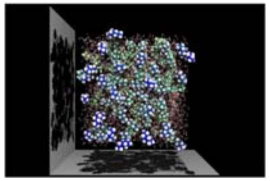
Εναπόθεση σε Cu(111)



Τσαλάκωμα γραφενίου

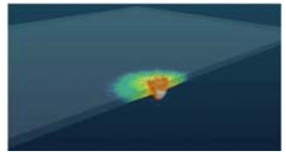


Τριβή



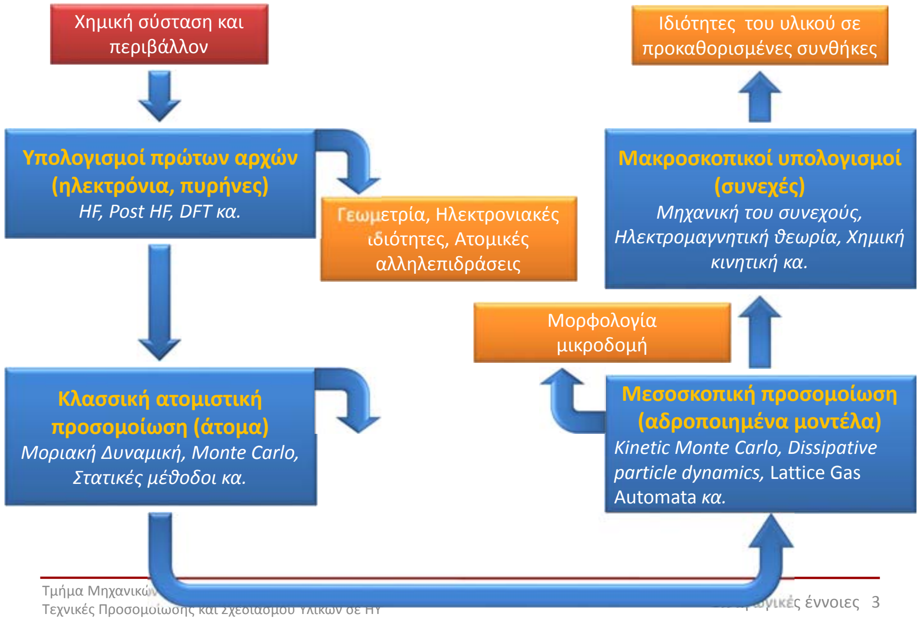
Ανάμιξη νερού-πεντανίου

Σκίσιμο γραφενίου

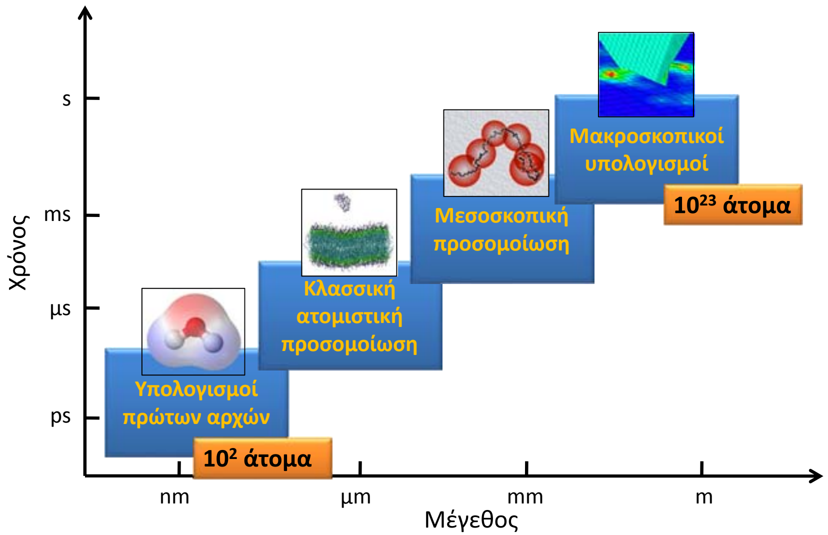


Πρόσκρουση σε φύλλο αλουμινίου

Υπολογιστικές μέθοδοι στην επιστήμη των υλικών



Χωρική και χρονική ιεράρχηση των υπολογιστικών μεθόδων



Τι είναι προσομοίωση;

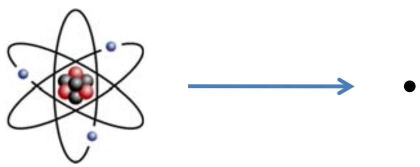
- «Υπολογιστικό πείραμα» το οποίο πραγματοποιείται πάνω σε ένα μοντέλο συστήματος.
- Η προσομοίωση συμβάλει στη μελέτη, σχεδιασμό, πρόβλεψη, βελτίωση και ανάλυση καταστάσεων που είναι πολύπλοκες για μια καθαρά θεωρητική αντιμετώπιση και δύσκολες ή αδύνατες για μια *πειραματική* επεξεργασία.
- Έχει καθιερωθεί σαν μέθοδος που συμβάλει στην κατανόηση των φυσικών διεργασιών.

Σχέση ανάμεσα σε θεωρία-πείραμα-προσομοίωση

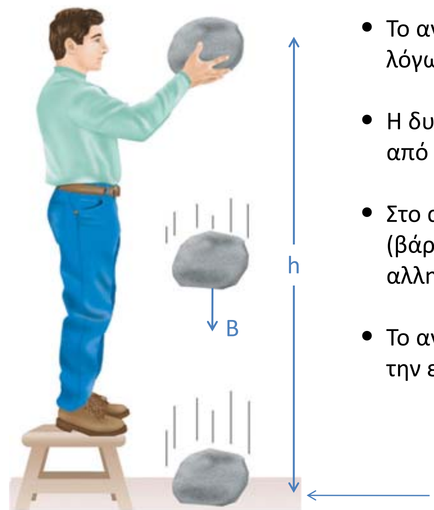
Computer Simulation of Liquids, M.P. Allen, D.J. Tildesley

Βασικές παραδοχές της κλασσικής ατομιστικής προσομοίωσης

1) Η δομική μονάδα όλων των φυσικών συστημάτων είναι το **άτομο**.
2) Η δομή των ατόμων (πυρήνες, ηλεκτρόνια) **δεν λαμβάνεται υπόψη**.
3) Τα άτομα θεωρούνται ως **σημειακές μάζες.**
4) Τα άτομα **αλληλεπιδρούν** μεταξύ τους μέσω κλασσικών δυναμικών.



Ένα γνωστό ανάλογο – Η βαρυτική αλληλεπίδραση



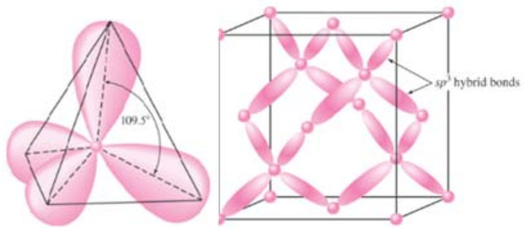
- Το αντικείμενο έχει δυναμική ενέργεια λόγω της βαρυτικής αλληλεπίδρασης.
- Η δυναμική του ενέργεια εξαρτάται από την απόσταση του από τη γη.
- Στο αντικείμενο ασκείται δύναμη (βάρος) λόγω της βαρυτικής αλληλεπίδρασης.
- Το αντικείμενο κινείται (πέφτει) υπό την επίδραση του βάρους του.

Σημείο αναφοράς με δυναμική ενέργεια 0

Είδη αλληλεπίδρασης

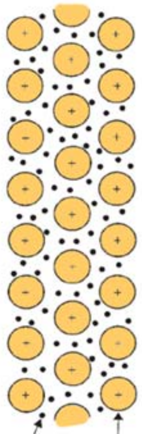
- Μεταλλικός δεσμός
- Ομοιοπολικός δεσμός
- Ιοντικός δεσμός
- Δεσμός υδρογόνου
- Αλληλεπίδραση Van der Waals

Ομοιοπολικός δεσμός



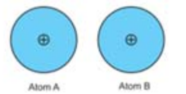
Μεθάνιο Διαμάντι

Μεταλλικός δεσμός



Ηλεκτρόνια Ιόντα

Αλληλεπίδραση VdW



Συμμετρική κατανομή φορτίου

Στιγμιαίο δίπολο Επαγόμενο φορτίο

Στιγμιαίο δίπολο Επαγόμενο φορτίο

Δυναμικά αλληλεπίδρασης

- Η αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων εκφράζεται μέσω του δυναμικού αλληλεπίδρασης.
- Για N σωματίδια το δυναμικό είναι συνάρτηση μόνο των ατομικών θέσεων $r_1, r_2, \ldots r_N$
- Η συνολική δυναμική ενέργεια του συστήματος προκύπτει από την άθροιση όλων των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων του συστήματος. Έχει τη γενική μορφή:

$$\boxed{U(r_1, r_2, \ldots r_N) = \sum_i V_1(r_i) + \sum_i \sum_{j>i} V_2(r_i, r_j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j>i} V_3(r_i, r_j, r_k) + \ldots}$$

V_1 Αλληλεπίδραση με εξωτερικό πεδίο.

V_2 Δυναμικό ζευγών. Εξαρτάται από την απόσταση μεταξύ των ατόμων i και j: $V_2(r_{ij})$

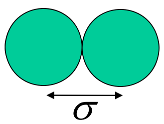
V_3 Δυναμικό τριών σωμάτων. Σημαντικός όρος στην υγρή και στερεή φάση.

Δυναμικό σκληρής σφαίρας

Τα άτομα θεωρούνται ως σκληρές σφαίρες με διάμετρο σ που ποτέ δεν επικαλύπτονται. Το δυναμικό αλληλεπίδρασης έχει τη μορφή:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{για} \quad r \geq \sigma \\ \infty & \text{για} \quad r < \sigma \end{cases}$$

Δεν είναι ρεαλιστικό μοντέλο για φυσικά συστήματα, αλλά ήταν από τα πρώτα συστήματα που προσομοιώθηκαν.

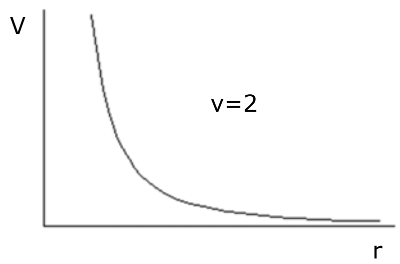


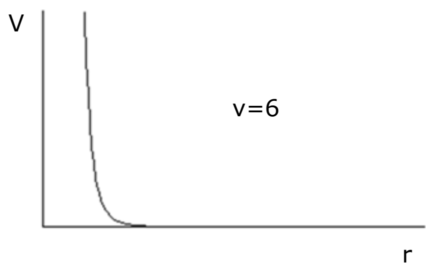
Δυναμικό μαλακής σφαίρας

Το δυναμικό αλληλεπίδρασης έχει τη μορφή:

$$V(r) = \frac{a}{r^{\nu}}$$

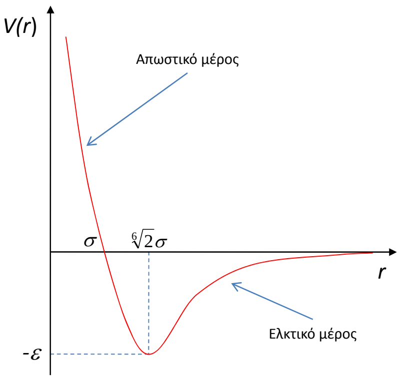
Το δυναμικό μαλακής σφαίρας γίνεται προοδευτικά «σκληρότερο» καθώς η παράμετρος ν αυξάνει:





Δυναμικό Lennard-Jones

$$V(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$$



- Παρουσιάζει τις τυπικές ιδιότητες των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων
- Ελκτικό μέρος της μορφής $-1/r^6$ σε μεγάλες αποστάσεις (εξαιτίας των δυνάμεων διασποράς London).
- Απωστικό μέρος σε μικρές αποστάσεις λόγω επικάλυψης ηλεκτρονιακών νεφών.
- Αρνητικό πηγάδι υπεύθυνο για τη συνοχή σε συμπυκνωμένες φάσεις.

Δυναμικό Lennard-Jones

Τυπικές τιμές για τα ε και σ:

Atom	Source	ε/k_B(K)	σ(nm)
H	[Murad and Gubbins 1978]	8.6	0.281
He	[Maitland *et al.* 1981]	10.2	0.228
C	[Tildesley and Madden 1981]	51.2	0.335
N	[Cheung and Powles 1975]	37.3	0.331
O	[English and Venables 1974]	61.6	0.295
F	[Singer *et al.* 1977]	52.8	0.283
Ne	[Maitland *et al.* 1981]	47.0	0.272
S	[Tildesley and Madden, 1981]	183.0	0.352
Cl	[Singer *et al.* 1977]	173.5	0.335
Ar	[Maitland *et al.* 1981]	119.8	0.341
Br	[Singer *et al.* 1977]	257.2	0.354
Kr	[Maitland *et al.* 1981]	164.0	0.383

Computer Simulation of Liquids, M.P. Allen, D.J. Tildesley

Το δυναμικό Lennard-Jones μπορεί να χρησιμοποιηθεί όπου υπάρχουν ασθενείς αλληλεπιδράσεις τύπου VdW πχ. ευγενή αέρια ή διαμοριακές αλληλεπιδράσεις σε οργανικά μόρια.

Σε περίπτωση ανόμοιων ατόμων χρησιμοποιούνται συνδυαστικοί κανόνες για την εκτίμηση των ε και σ.
Πχ. Κανόνας Lorentz-Berthelot :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\sigma_{\alpha\alpha} + \sigma_{\beta\beta}}{2} \qquad \varepsilon_{\alpha\beta} = \sqrt{\varepsilon_{\alpha\alpha}\varepsilon_{\beta\beta}}$$

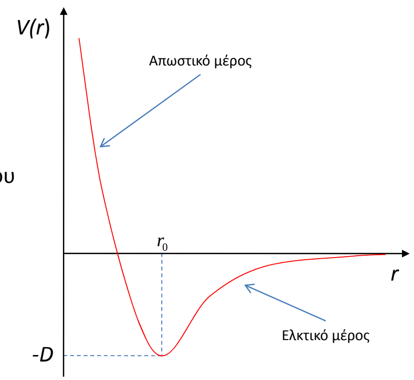
Sir John Edward Lennard-Jones 1894-1954

Δυναμικό Morse

Το δυναμικό Morse έχει τη μορφή:

$$V(r) = D(1 - e^{-a(r - r0)})^2 - D$$

D Βάθος πηγαδιού
r_0 Θέση ελαχίστου
α Ρυθμίζει την καμπυλότητα του ελαχίστου



Philip McCord Morse 1903-1985

Υπολογισμός ολικής δυναμικής ενέργειας συστήματος

- Θεωρούμε ένα σύστημα Ν σωματιδίων που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους με γνωστό δυναμικό V(r).
- Η συνολική δυναμική ενέργεια του συστήματος προκύπτει από την άθροιση όλων των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων του συστήματος.

U = 0
Για όλα τα άτομα i=1,N-1
Για όλα τα άτομα j=i+1,N

$$r = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$$

U = U + V(r)

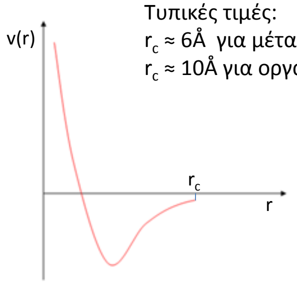
Εμβέλεια δυναμικού

Υποθέτοντας δυναμικό δύο σωμάτων, η ολική δυναμική ενέργεια είναι:

$$U(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots\vec{r}_N)=\sum_{i=1}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N}V(r_{ij})$$

Ενώ η εμβέλεια του δυναμικού V(r) είναι άπειρη, στην πράξη μετά από μια απόσταση αποκοπής r_c θεωρείται μηδέν.

Τυπικές τιμές:
$r_c \approx 6$Å για μέταλλα
$r_c \approx 10$Å για οργανικά



Σημαντικό όφελος: Μείωση των γειτόνων του κάθε ατόμου και κατά συνέπεια των υπολογισμών της V(r).

$$U(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots\vec{r}_N)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{n_i}V(r_{ij})$$

n_i: Πλήθος ατόμων με $r_{ij}<r_c$ (γείτονες του ατόμου i)

Βασικοί τρόποι μελέτης

- Στατική μελέτη
  Βασίζεται στην εύρεση ελαχίστου της δυναμικής ενέργειας σαν συνάρτηση των ατομικών θέσεων.
- Προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής
  Αιτιοκρατική μεθοδολογία, με την οποία βρίσκουμε την εξέλιξη του συστήματος στο χρόνο επιλύοντας τις εξισώσεις κίνησης. Ως αποτέλεσμα παίρνουμε την τροχιά, δηλαδή τις θέσεις και τις ταχύτητες των ατόμων σαν συνάρτηση του χρόνου.
- Προσομοίωση Monte Carlo
  Στοχαστική μεθοδολογία με την οποία παράγονται μικροκαταστάσεις του συστήματος. Αναπτύχθηκε στο τέλος του 2ου παγκόσμιου πολέμου για τη μελέτη διάχυσης νετρονίων σε σχάσιμο υλικό. Δεν υπάρχει η έννοια του χρόνου.

Είναι η κλασσική προσέγγιση επαρκής ;

- Στην κλασσική προσέγγιση η περαιτέρω δομή των ατόμων (πυρήνας, ηλεκτρόνια) δεν λαμβάνεται υπόψη.
- Κατά συνέπεια δεν μπορούμε να πάρουμε πληροφορίες για ηλεκτρονιακές καταστάσεις, κατανομές φορτίου και γενικά ιδιότητες που εξαρτώνται από την ηλεκτρονική δομή των ατόμων.
- Η επιλογή του κατάλληλου δυναμικού αλληλεπίδρασης δεν είναι εύκολη.
- Δυναμικά που δίνουν σωστά αποτελέσματα σε ένα περιβάλλον (πχ. τέλειος κρύσταλλος) μπορεί να αποτύχουν σε άλλα περιβάλλοντα (πχ. με ατέλειες).
  → Μη μεταφέρσιμο δυναμικό αλληλεπίδρασης.

Μέθοδοι από πρώτες αρχές (ab initio)

- Μπορούμε να παρακάμψουμε τη δυσκολία επιλογής του σωστού δυναμικού αλληλεπίδρασης για τον υπολογισμό της δυναμικής ενέργειας του συστήματος εφαρμόζοντας απευθείας τις αρχές της κβαντικής μηχανικής.
- Τέτοιου τύπου υπολογισμοί είναι «μεταφέρσιμοι» αφού δεν απαιτούν πληροφορίες για κάποια συγκεκριμένη δομή, περιβάλλον ή συνθήκες του συστήματος.
- Οι μέθοδοι από πρώτες αρχές θεωρούν ως βασικές δομικές μονάδες τους πυρήνες και τα ηλεκτρόνια.

Εξίσωση Schrodinger

- Τα χαρακτηριστικά ενός συστήματος καθορίζονται πλήρως εάν γνωρίζουμε την κυματοσυνάρτηση Ψ.
- Η εξέλιξη ενός συστήματος στο χρόνο καθορίζεται από την «εξαρτώμενη από το χρόνο εξίσωση Schrodinger»:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

- Οι στάσιμες καταστάσεις ενός συστήματος περιγράφονται από την εξίσωση ιδιοτιμών:

$$H\Psi = \varepsilon\Psi$$

Η Χαμιλτονιανή

Θεωρούμε σύστημα που αποτελείται από N πυρήνες (μάζες M, συντεταγμένες R) και n ηλεκτρόνια (μάζες m, συνεταγμένες r). Η Χαμιλτονιανή είναι:

$$\boxed{H = T_N(R) + T_e(r) + V_{NN}(R) + V_{ee}(r) + V_{eN}(r,R)}$$

$$T_N(R) = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_i^2$$
Κινητική ενέργεια πυρήνων

$$T_e(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{n} \nabla_i^2$$
Κινητική ενέργεια ηλεκτρονίων

$$V_{NN}(R) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N} \frac{Z_i Z_j e^2}{R_{ij}}$$
Δυναμική ενέργεια πυρήνων

$$V_{ee}(r) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} \frac{e^2}{r_{ij}}$$
Δυναμική ενέργεια ηλεκτρονίων

$$V_{eN}(r,R) = -\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{n} \frac{Z_i e^2}{r_{ij}}$$
Αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων-πυρήνων

Πότε ισχύει η κλασσική προσέγγιση ;

Η κλασσική προσέγγιση ισχύει όταν το θερμικό μήκος κύματος de Broglie

$$\Lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$$

είναι κατά πολύ μικρότερο από την απόσταση α των πλησιέστερων γειτόνων

$$\Lambda << a$$

Συστήματα με δύο τύπους ατόμων

- Θεωρείστε ένα σύστημα που περιέχει δύο τύπους ατόμων πχ. NaCl.
- Για να υπολογίσουμε τη συνολική δυναμική ενέργεια χρειάζεται να γνωρίζουμε τα επιμέρους δυναμικά αλληλεπίδρασης:

V_{11} Αλληλεπίδραση μεταξύ ατόμων ιδίου τύπου 1 (πχ Na)

V_{22} Αλληλεπίδραση μεταξύ ατόμων ιδίου τύπου 2 (πχ Cl)

V_{12} Αλληλεπίδραση μεταξύ ατόμων διαφορετικού τύπου (πχ Na-Cl)

Στατική μελέτη

- Βασίζεται στην εύρεση ελαχίστου της ενέργειας σαν συνάρτηση των ατομικών θέσεων.
- Σε περιπτώσεις όπου χρησιμοποιούνται περιοδικές οριακές συνθήκες η ελαχιστοποίηση της ενέργειας μπορεί να γίνει και ως προς τις διαστάσεις του πρωτεύοντος κουτιού.
- Χρησιμοποιούνται αποκλειστικά αριθμητικές μέθοδοι ελαχιστοποίησης οι οποίες συνήθως βρίσκουν ένα μόνο τοπικό ελάχιστο.

Παράδειγμα #1

Η αλληλεπίδραση δύο ατόμων περιγράφεται από το δυναμικό Lennard-Jones.

a. Βρείτε την απόσταση όπου το δυναμικό αλληλεπίδρασης έχει την ελάχιστη τιμή του.
b. Ποια είναι η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης στο ελάχιστο ;
c. Ποια είναι η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο ;

Παράδειγμα #1

a. Βρείτε την απόσταση όπου το δυναμικό αλληλεπίδρασης έχει την ελάχιστη τιμή του.

Το δυναμικό Lennard-Jones έχει τη μορφή

$$V(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$$

Για να έχουμε ελάχιστο πρέπει:

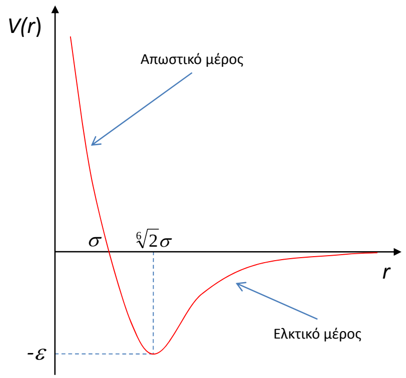
$$\frac{dV}{dr} = 0$$

Βρίσκουμε την παράγωγο:

$$\frac{dV}{dr} = 4\varepsilon\left[-12\frac{\sigma^{12}}{r^{13}} + 6\frac{\sigma^{6}}{r^{7}}\right] =$$

$$-\frac{24\varepsilon}{r}\left[2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] =$$

$$-\frac{24\varepsilon}{r}\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\left[2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} - 1\right]$$



Παράδειγμα #1

Βρίσκουμε που μηδενίζεται η παράγωγος:

$$\frac{dV}{dr} = 0 \;\Rightarrow$$

$$-\frac{24\varepsilon}{r}\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\left[2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} - 1\right] = 0 \;\Rightarrow$$

$$2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} = 1 \;\Rightarrow$$

$$r^{6} = 2\sigma^{6} \;\Rightarrow$$

$$\boxed{r = \sqrt[6]{2}\sigma}$$

Παράδειγμα #1

b. Ποια είναι η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης στο ελάχιστο ;

$$V(\sqrt[6]{2}\sigma) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{2^{\frac{1}{6}}\sigma}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{2^{\frac{1}{6}}\sigma}\right)^{6}\right] =$$

$$4\varepsilon\left[\left(\frac{1}{2^{\frac{1}{6}}}\right)^{12} - \left(\frac{1}{2^{\frac{1}{6}}}\right)^{6}\right] =$$

$$4\varepsilon\left[\frac{1}{4} - \frac{1}{2}\right] =$$

$$4\varepsilon\left[-\frac{1}{4}\right] =$$

$$-\varepsilon$$

Παράδειγμα #1

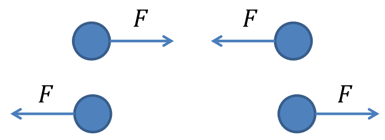
c. Ποια είναι η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο ;

Η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο είναι:

$$F = -\frac{dV}{dr}$$

Έχουμε ήδη βρεί την πρώτη παράγωγο, συνεπώς:

$$F = \frac{24\varepsilon}{r}\left[2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$$



Ελκτική δύναμη $r > \sqrt[6]{2}\sigma$

Απωστική δύναμη $r < \sqrt[6]{2}\sigma$

Συμπληρωματικό ερώτημα: Σε ποια απόσταση πρέπει να τοποθετήσουμε τα άτομα ώστε να μην ασκείται καμία δύναμη μεταξύ τους;

Παράδειγμα #2

Η αλληλεπίδραση δύο ατόμων περιγράφεται από το δυναμικό Morse.

a. Βρείτε την απόσταση όπου το δυναμικό αλληλεπίδρασης έχει την ελάχιστη τιμή του.
b. Ποια είναι η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης στο ελάχιστο ;
c. Ποια είναι η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο ;

Παράδειγμα #2

a. Βρείτε την απόσταση όπου το δυναμικό αλληλεπίδρασης έχει την ελάχιστη τιμή του.

Το δυναμικό Morse έχει τη μορφή:

$$V(r) = D\left(1 - e^{-a(r-r_0)}\right)^2 - D$$

Για να έχουμε ελάχιστο πρέπει:

$$\frac{dV}{dr} = 0$$

Βρίσκουμε την παράγωγο:

$$\frac{dV}{dr} = 2D\left(1 - e^{-a(r-r_0)}\right)\left(1 - e^{-a(r-r_0)}\right)' =$$

$$-2D\left(1 - e^{-a(r-r_0)}\right)e^{-a(r-r_0)}(-a) =$$

$$2Da\left(1 - e^{-a(r-r_0)}\right)e^{-a(r-r_0)}$$

Παράδειγμα #2

Βρίσκουμε που μηδενίζεται η παράγωγος:

$$\frac{dV}{dr} = 0 \;\Rightarrow$$

$$2Da\left(1 - e^{-\,a(r-r_0)}\right)e^{-\,a(r-r_0)} = 0 \;\Rightarrow$$

$$\left(1 - e^{-\,a(r-r_0)}\right) = 0 \;\Rightarrow$$

$$e^{-\,a(r-r_0)} = 1 \;\Rightarrow$$

$$-\,a(r - r_0) = 0 \;\Rightarrow$$

$$\boxed{r = r_0}$$

Παράδειγμα #2

b. Ποια είναι η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης στο ελάχιστο ;

$$V(r_0) = D\left(1 - e^{-a(r_0-r_0)}\right)^2 - D =$$

$$D(1 - 1) - D =$$

$$-D$$

Παράδειγμα #2

c. Ποια είναι η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο ;

Η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο είναι:

$$F = -\frac{dV}{dr}$$

Έχουμε ήδη βρεί την πρώτη παράγωγο, συνεπώς:

$$F = -2Da\left(1 - e^{-\,a(r-r_0)}\right)e^{-\,a(r-r_0)}$$

Μπορούμε να κάνουμε το ίδιο για όλες τις αλληλεπιδράσεις ;

Μπορούμε να κάνουμε το ίδιο για το δυναμικό αλληλεπίδρασης Buckingham ;

$$V(r) = Ae^{-Br} - \frac{C}{r^6}$$

$$\frac{dV}{dr} = -ABe^{-Br} + 6\frac{C}{r^7}$$

$$\frac{dV}{dr} = 0 \;\Rightarrow$$

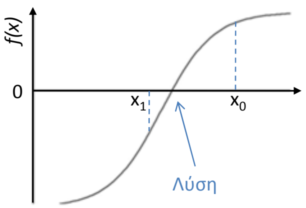
$$-ABe^{-Br} + 6\frac{C}{r^7} = 0 \;\Rightarrow$$

$$ABe^{-Br} = 6\frac{C}{r^7}$$

Χρειαζόμαστε αριθμητικές μεθόδους για να βρούμε το ελάχιστο.

Αριθμητική εύρεση ελαχίστου της ενέργειας

Μέθοδος Newton για εύρεση ριζών της εξίσωσης $f(x)=0$



Επαναληπτική αριθμητική μέθοδος

1. Δίνεται αρχικό σημείο x_0
2. Επανάληψη για k=0,1,2,…
   - α) Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού $|f(x)|<\varepsilon$
   - β) Υπολογισμός του βήματος Newton
   - γ) Εύρεση νέου σημείου: $x_{k+1}=x_k+h$

Ανάπτυγμα Taylor της συνάρτησης f(x) γύρω από το σημείο x

$$\boxed{f(x+h)=f(x)+hf'(x)}+\frac{h^2}{2!}f''(x)+\frac{h^3}{3!}f'''(x)+\ldots$$

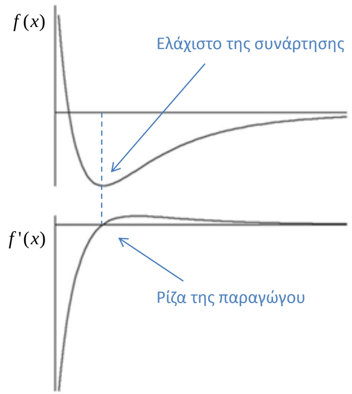
Θέλουμε ένα βήμα τέτοιο ώστε να φτάσουμε στη λύση

$$0=f(x)+hf'(x)\Rightarrow \boxed{h=-\frac{f(x)}{f'(x)} \quad \text{Βήμα Newton}}$$

Sir Isaac Newton 1642-1726

Αριθμητική εύρεση ελαχίστου της ενέργειας

Μέθοδος Newton για εύρεση ελαχίστου



Στο ελάχιστο ισχύει $f'(x)=0$ οπότε εφαρμόζουμε τη διαδικασία εύρεσης ριζών στην $f'(x)$

$$f'(x+h)=f'(x)+hf''(x)$$
$$0=f'(x)+hf''(x)$$

$$\boxed{h=-\frac{f'(x)}{f''(x)} \quad \text{Βήμα Newton για εύρεση ελαχίστου}}$$

Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας $U(\vec{r})$ είναι πολυδιάστατη:

$$\vec{g}(\vec{r}+\vec{h})=\vec{g}(\vec{r})+G(\vec{r})\vec{h}$$

$$0=\vec{g}(\vec{r})+G(\vec{r})\vec{h}$$

$$\boxed{\vec{h}=-G^{-1}(\vec{r})\,\vec{g}(\vec{r}) \quad \text{Βήμα Newton για πολυδιάστατη συνάρτηση}}$$

$\vec{g}(\vec{r})$ Διάνυσμα πρώτων παραγώγων της $U(\vec{r})$

$G(\vec{r})$ Πίνακας δεύτερων παραγώγων της $U(\vec{r})$