

## تمرین سری سوم درس دینامیک مولکولی: موعده تحویل سه شنبه ۲۰ فروردین

یک مکعب از جنس نقره با ابعاد ۲ در ۲ در ۲ برابر ثابت شبکه بسازید. می خواهیم با استفاده از پتانسیل ساتن-چن سیستم را مدل نماییم.

با استفاده از روش تندترین شیب ساختار بهینه قطعه را تعیین نمایید. ساختار را تا حدی بهینه نمایید که تغییرات انرژی در هر گام کمتر از 0.01 الکترون ولت گردد. تعداد مراحل و زمان بهینه سازی چه مقدار است؟ ساختار اولیه و نهایی مولکول را نشان دهید. در یک نمودار مقدار انرژی بر حسب مرحله را برای این روش را تا ۲۰۰ مرحله ترسیم نمایید. در صورت امکان فیلمی از گذار سیستم از شرایط اولیه به شرایط نهایی تهیه کنید.