

تمرین LAMMPS

شبیه‌سازی حرکت فولرین بر روی نانولوله کربنی توسط نرم‌افزار LAMMPS

زمان تحویل: تا ساعت ۲۴ شنبه ۱ تیر ۱۳۹۸

نتایج: فایل input, data, گزارش pdf و فیلم کوتاهی از شبیه‌سازی تا زمان مقرر به smhlavasani@gmail.com فرستاده شود.

مشخصات نانولوله کربنی: طول تعادلی پیوند کربن-کربن در نانولوله‌های کربنی در دمای ۳۰۰ کلوین را یافته و مرجع آن را قید نمایید. با این طول پیوند یک نانولوله کربنی با ضرایب کایرال $(n,m)=(20,20)$ توسط نرم‌افزار vmd بسازید که محور آن در راستای Z و طول آن در این راستا ۸۰ آنگسترم باشد. سپس موقعیت مرکز جرم نانولوله را به $(0,0,0)$ انتقال دهید.

مشخصات فولرین: فایل PDB فولرین (C_{60}) را از یک مرجع معتبر دریافت یا از مدل‌های آماده نرم‌افزارهای مدل‌سازی مولکولی استخراج نموده و مرجع آن را قید نمایید. سپس موقعیت مرکز جرم فولرین را به مختصات $(r,0,0)$ و خارج از نانولوله انتقال دهید که در آن r فاصله تعادلی مرکز فولرین از محور نانولوله است.

جعبه شبیه‌سازی: مرز جعبه شبیه‌سازی در راستای X و Y را ثابت و در راستای Z تناوبی در نظر بگیرید. ابعاد جعبه شبیه‌سازی به صورت تقریبی از نقطه $(-40,-30,-30)$ تا $(40,30,30)$ در نظر گرفته شود. توجه نمایید که طول جعبه شبیه‌سازی در راستای Z را به نحوی تعریف نمایید که اتم‌های ابتدا و انتهای نانولوله به علت وجود شرایط مرزی با فاصله مناسب از هم قرار گیرند.

پتانسیل‌ها: پتانسیل استفاده‌شده برای نانولوله و فولرین هرکدام به صورت جداگانه از نوع Tersoff در نظر گرفته شود. راهنمایی: دو گونه متفاوت اتمی برای نانولوله و فولرین در نظر گرفته و از دستورات زیر

```
pair_coeff * * tersoff 1 SiC.tersoff C NULL
```

```
pair_coeff * * tersoff 2 SiC.tersoff NULL C
```

برای تعریف جداگانه پتانسیل tersoff برای نانولوله و فولرین استفاده نمایید. دقت نمایید که در pair_style نیز می‌بایست دو بار عبارت tersoff ذکر گردد. همچنین پتانسیل مابین نانولوله و فولرین از نوع lj/cut با شعاع قطع ۱۲ در نظر گرفته شود. ضرایب پتانسیل لنارد-جونز از فایل par_all27_prot_lipid_na.inp نرم‌افزار VMD استخراج گردد. ضرایب گونه اتمی CA که نماینده کربن آروماتیک است، برای این منظور مناسب می‌باشد. توجه داشته باشید که فرمول ارائه‌شده در پتانسیل Charmm با فرمت پتانسیل LJ 12-6، کمی متفاوت است؛ بنابراین می‌بایست پارامترها برای استفاده در نرم‌افزار LAMMPS اصلاح گردد. به اختلاف واحدها نیز توجه فرمایید.

مراحل و شرایط شبیه‌سازی:

۱. دمای اولیه سیستم را ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته و سرعت مرکز جرم و دوران مرکز جرم هر جز را جداگانه صفر نمایید. ابعاد باکس شبیه‌سازی را به نحوی تنظیم نماید که انرژی پتانسیل نانولوله کمینه گردد. این فرایند موجب خواهد شد تنش‌های اولیه موجود در نانولوله به حداقل برسد و از اعوجاج‌های آتی نانولوله جلوگیری شود. کاهش مقدار انرژی پتانسیل را ثبت و گزارش نمایید. برای این منظور از دستور زیر بهره گرفته و عملکرد جملات این دستور را شرح دهید.

```
fix 1 CNT box/relax iso 0.0 dilate partial
```

پس از اتمام کمینه‌سازی انرژی و در صورت حرکت نانولوله، با دستور `displace_atoms` موقعیت مرکز جرم آن را به (0,0,0) بازگردانید. سپس فولرین را نیز دقیقاً همانند نانولوله حرکت دهید تا موقعیت تعادلی آن‌ها نسبت به هم حفظ گردد!

۲. یک گروه متشکل از ۴ اتم که در سرتاسر طول و زوایای نانولوله توزیع شده باشد در نظر گرفته و موقعیت مکانی این اتم‌ها را با دستور زیر و با یک فنر نسبتاً ضعیف به موقعیت اولیه خودشان وصل نمایید. با این روش به صورت تقریبی نانولوله را در جای خود ثابت می‌کنید، درحالی‌که اتم‌های نانولوله می‌توانند آزادانه در حال ارتعاش باشند. عملکرد جملات این دستور را شرح دهید.

```
unfix 1
```

```
fix 2 4atoms spring/self 0.1 xyz
```

اکنون با هنگرد ذره-فشار-دما ثابت (NPT) دمای سیستم را بر روی ۳۰۰ کلوین و فشار را بر روی ۰ بار تنظیم نموده و سیستم را به مدت ۱ ns واهلید. با دستور `compute temp/com` دمای فولرین را به نحوی حساب نماید که سرعت مرکز جرم از آن کاسته شده باشد. سپس با دستور `fix_modify` از دمای اصلاح شده برای هنگرد NPT استفاده نمایید. ضرایب دمپینگ مناسب را گزارش کنید. گام زمانی حل را ۱ fs در نظر بگیرید.

۳. درنهایت، از هنگرد ذره-حجم-دما ثابت (NVT) استفاده نموده و در دمای ۳۰۰ کلوین سیستم را به مدت ۵ ns شبیه‌سازی نمایید. همانند مرحله قبل از دستور `fix_modify` و دمای اصلاح شده برای محاسبات هنگرد NVT نیز استفاده نمایید. در این قسمت حرکت فولرین بر روی نانولوله را مورد ارزیابی قرار دهید.

نتایج مطلوب و نحوه گزارش دهی: نتایج زیر را در تمامی مراحل با دستورات `variable` یا `compute`

محاسبه کرده و هر ۱۰۰ گام زمانی در فایل `log` ثبت نماید. مختصات اتمی را نیز هر ۱۰۰۰ گام زمانی در فایل `dump` ثبت نمایید. سپس توسط نرم‌افزار MATLAB متغیرهای خواسته شده را برحسب زمان رسم نمایید و همراه با تحلیل در گزارش pdf بیاورید. همچنین توضیح مختصری درباره دستورات استفاده شده در فایل `input` و `data` آورده و شرایط فرض شده در مسئله خود را بنویسید.

۱. انرژی پتانسیل، فشار و دمای کل در مرحله ۱، ۲ و ۳

۲. انرژی پتانسیل، فشار و دمای نانولوله و فولرین در مرحله ۱، ۲ و ۳
۳. مکان، سرعت و سرعت دورانی مرکز جرم فولرین در هر سه راستای مختصات در مرحله ۱، ۲ و ۳
۴. مکان، سرعت و سرعت دورانی مرکز جرم نانولوله در هر سه راستای مختصات در مرحله ۱، ۲ و ۳
۵. پتانسیل و نیروی مابین فولرین و نانولوله در هر سه راستا در مرحله ۱، ۲ و ۳
۶. متوسط مجذور جابجایی (mean square displacement) فولرین در راستای z را برحسب زمان برای مرحله ۳ ترسیم کنید. سپس ضریب پخش (coefficient of diffusion) فولرین در این راستا را به دست آورید. روش و فرمولاسیون محاسبه ضریب پخش را شرح دهید.

با آرزوی موفقیت،

حسینی لواسانی