بخش دوم : تحلیل نمونه کد شبیه سازی دینامیک مولکولی در لمپس

خط هایی از کد که با کارکتر # شروع می شوند به عنوان توضیحات فرض می شوند و اجرا نخواهند شد و فقط به شبیه ساز در مورد کدها کمک می کنند .(پیشنهاد می کنم همیشه از این توضیحات تو کدتون بزارین .)

```
# MD Run Graphene & CarbonNanotube

dimension       3
boundary        p p p

units           metal
atom_style      atomic

read_data       data.txt

group right id <= 96
group left  id => 925

group mid subtract all left right
group boundary union left right

#Group Command-------------------------

 mass          1  12.000

# Potential-----------------------------

 pair_style      airebo 3.0 0 1
 pair_coeff      * *  CH.airebo C
neighbor 2.0 nsq

# Initial velocities---------------------

velocity      mid create 300 1234 dist gaussian mom yes rot yes

# the run loop--------------------------

 fix             3  mid nve
 fix             1 left  nvt temp 100.0 100.0 0.01
 fix             2 right nvt temp 500.0 500.0 0.01

thermo          100
thermo_style    custom step temp  etotal press lx ly lz

timestep        0.01

dump            2 all xyz 100 c60.xyz
#restart         10000 restart.*

run             50000
```

دستور Dimension برای مشخص کردن تعداد ابعاد فیزیکی شبیه سازی استفاده می شود . مقدار ۲ برای دو بعدی و ۳ برای سه بعدی .

تعیین نوع دیواره ها برای هر بعد

تعیین نوع مقیاس ها و واحدهای حاکم بر شبیه سازی

تعیین نوع سبک اتمی به کار رفته در شبیه سازی

دریافت اطلاعات اتم ها و مولکول ها از فایل دیتا ورودی

تعریف گروه های مجزا و مشخص برای اتم ها و عضویت دادن به اتم ها در گروه های خاص برای بکارگیری راحت تر

تعیین جرم مولی برای اتم های موجود در شبیه سازی

تعیین نیروی های بین مولکولی و نوع محاسبات آن ها، آرگومان ها و عوامل موثر در محاسبات آن ها

تعیین سرعت ذره ها (اتم ها و مولکول ها و گروه های اتمی) این تنظیم پارمترها و آرگومان های مختلفی دارد .

تعیین شیوه محاسبه و چاپ متغیرهای ترمودینامیکی در شبیه سازی و تعیین انجام محاسبات بعد از چند گام زمانی

تعیین مقدار گام زمانی شبیه سازی بر حسب نانوثانیه

تعیین ویژگی های فایل های خروجی شبیه سازی و پارمترهایشان

تعیین تعداد گام های اجرا شدن شبیه سازی و انجام محاسبات

اعمال کردن نوعی ویژگی بر گروهی از اتم ها و کل سیستم مثلا میتوان گروهی از اتم ها را از لحاظ انرژی ، تعداد مول و حجم فیکس کنیم و یا کل اتم ها را از لحاظ تعداد مول ، حجم و دما بین دمای خاصی فیکس کنیم .

توضیحات بالا خیلی مختصر و جزیی است . برای فهم بهتر دستورها و مقادیر قابل تنظیم باید به مستندات LAMMPS مراجعه شود . (اگه میخواین یادبگیرین)

WWW.1PAPER.BLOG.IR