



مروری بر پتانسیل های بین اتمی در لمپس

دوره آموزشی نرم افزار LAMMPS

دانشگاه تهران

اسفند ۱۳۸۹

کیارش گردیز



مقدمه ای بر پتانسیل های بین اتمی در لمپس

```
boundary    p p p
atom_style  atomic
units       lj
```

```
lattice     fcc 0.2
region      mybox block 0 5 0 5 0 5
create_box  1 mybox
create_atoms 1 region mybox
mass        1 1.0
velocity    all create 1 123456
```

```
pair_style  lj/cut 2.5
pair_coeff   1 1 1.00 1.00 2.5
```

```
fix         myfix1 all nve
timestep     0.001
```

```
thermo      10
thermo_style custom step etotal temp press vol
```

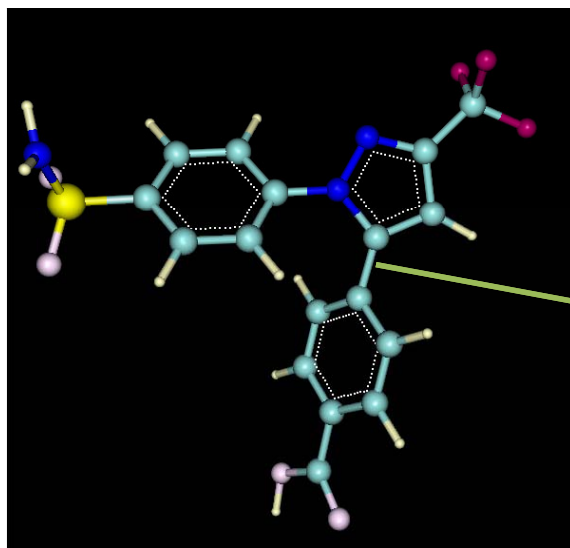
```
dump                     mydump1 all xyz 50 dump.xyz
run                      10000
```

تمرکز اصلی بر روی
خطوط تعیین کننده
نوع برهم کنش اتمها
در سیستم شبیه سازی

مقدمه ای بر پتانسیل های بین اتمی در لمپس

۱. اتمهای برهم کنش کننده در طول شبیه سازی بدون تغییر هستند.

- پتانسیل های باندی (Bond_style potentials)
- پتانسیل های زاویه ای (Angle_style potentials)
- پتانسیل های دایهedral (Dihedral_potentials)
- پتانسیل های نابجا (Improper_style potentials)



• ساختارهای زیستی، پلیمرها و ...

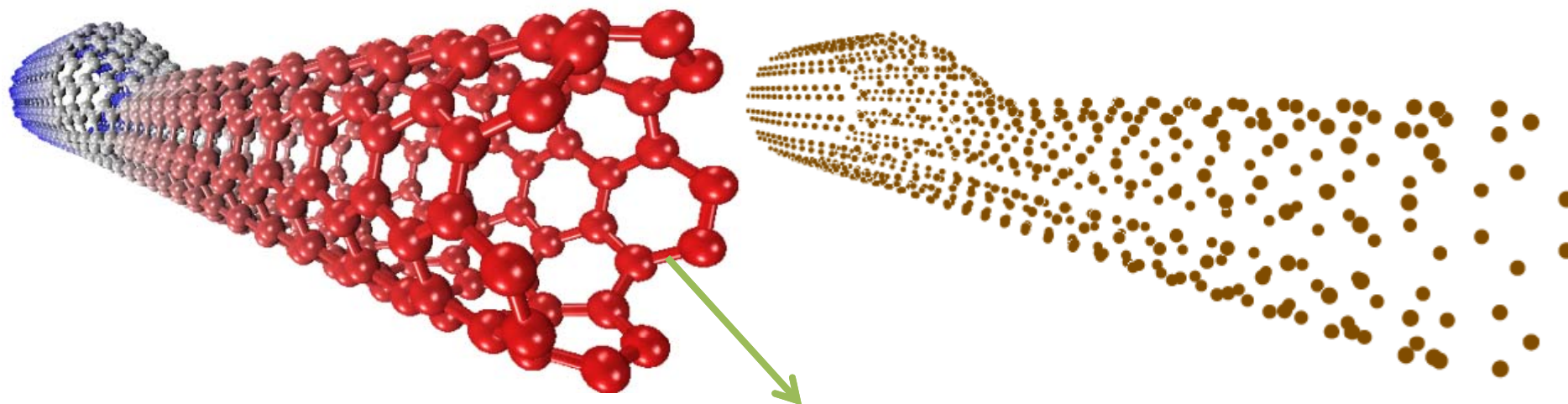
باند ثابت که در طول زمان شبیه سازی تغییر نمی کند.

مقدمه ای بر پتانسیل های بین اتمی در لمپس

۲. پتانسیل هایی که اتم های برهم کنش کننده با زمان تغییر می کنند.

– پتانسیل های جفت جفت (pair_style potentials)

• فلزات، نیم رساناها، برخی گازها و مایعات و ...

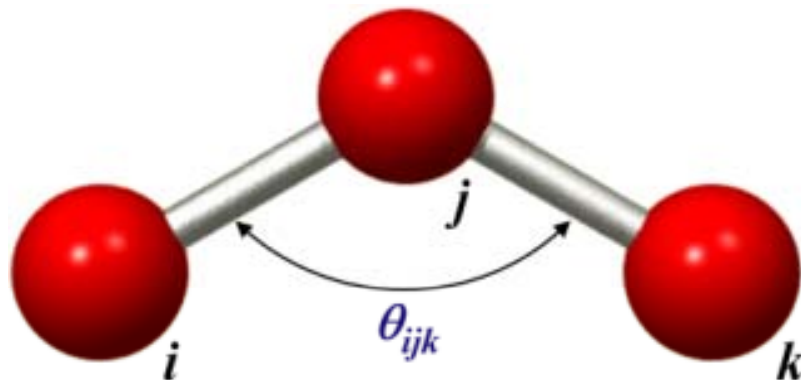


برهم کنش بین دو اتم در نانولوله دائمی نبوده و در طول زمان شبیه سازی تغییر می نماید.

انواع پتانسیل های pair_style

سه جسمی و چند جسمی

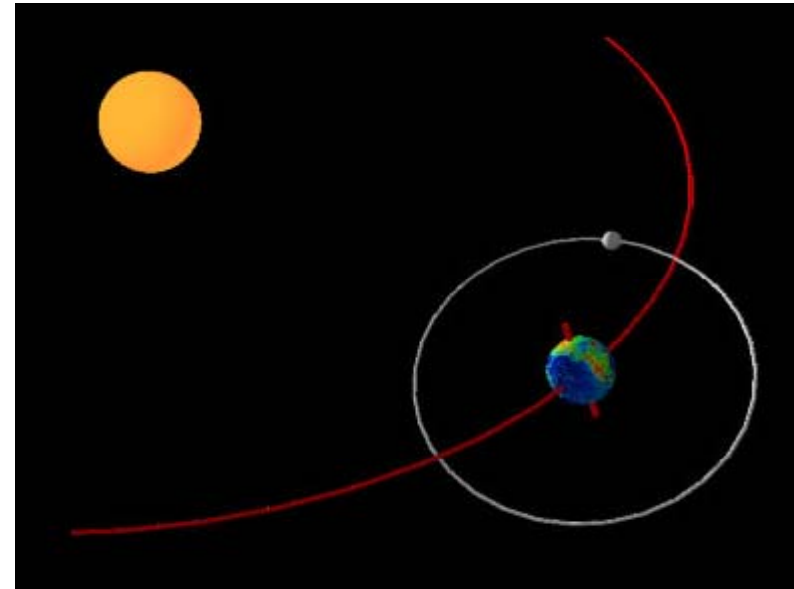
Stillinger-Weber
ترسوف (Tersoff)
AIREBO
EAM
MEAM



دو جسمی

لنارد جونز (Lennard-Jones)

مورس (Morse)



انواع پتانسیل های pair_style

• پتانسیل لنارد جونز John Lennard-Jones, 1924

– به لحاظ ریاضی ساده

– برهم کنش بین اتم ها و مولکول های خنثی

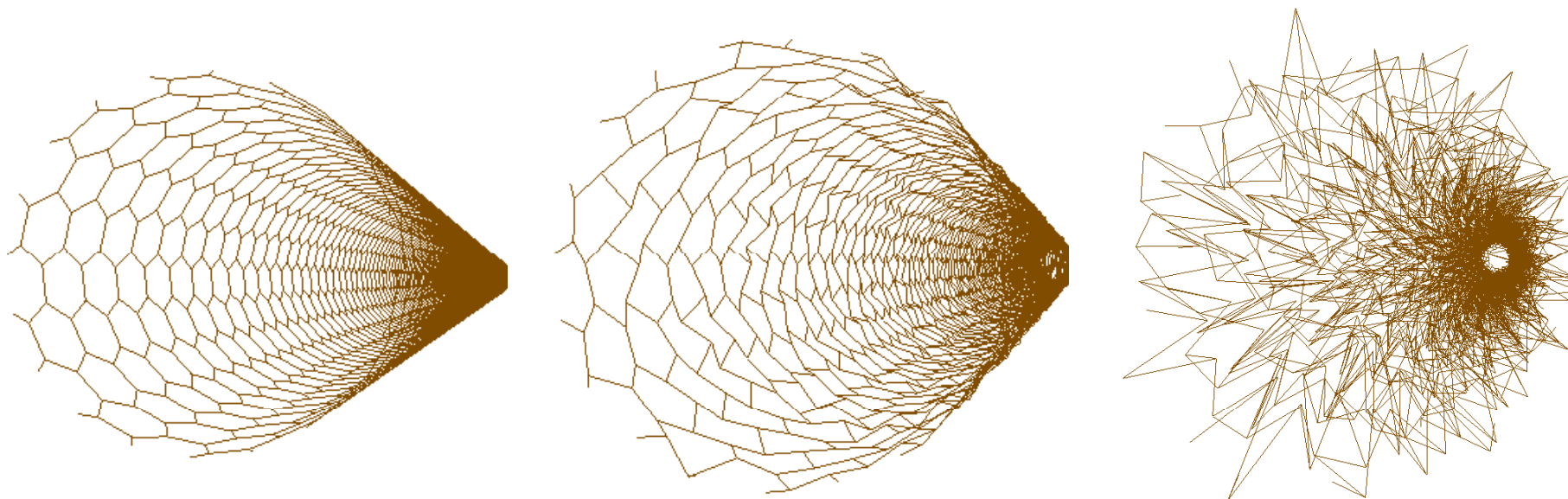
$$V_{LJ} = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad r < r_0$$

– علیرغم ظاهر ساده کاربرد گسترده در مقالات

• مدل سازی آرگون، پتانسیل مابین صفحات گرافن و ...

انواع پتانسیل های pair_style

- نتیجه اعمال پتانسیل لنارد جونز به نانو لوله کربنی



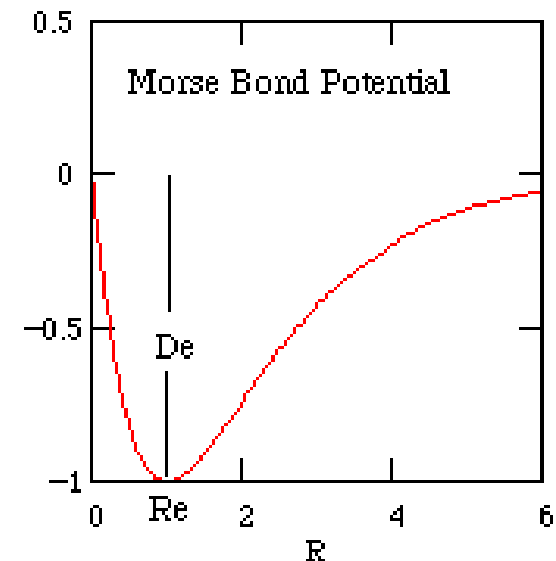
انواع پتانسیل های pair_style

Philip M. Morse, 1929

● پتانسیل مورس

- تقریب برای مولکول های دواتمی
- کاربرد در مدل سازی برخی فلزات مانند مس
- دیگر ساختارهای دارای پیوند کوالانسی

$$E = D_0 \left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right] \quad r < r_0$$



انواع پتانسیل های pair_style

• پتانسیل استلینگر-وهر Stillinger and Weber, Phys Rev B, 31, 5262 (1985)

Si.sw } — از اولین قدم ها برای مدل سازی نیم رساناها
 CdTe.sw } — فایل های پتانسیل استلینگر-وهر موجود در لمپس
 GaN.sw } /home/kiarash/lammps-18Jan2011/potentials ✓

$$E = \sum_i \sum_{j>i} \phi_2(r_{ij}) + \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k>j} \phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk})$$

$$\phi_2(r_{ij}) A_{ij} \epsilon_{ij} \left[B_{ij} \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{p_{ij}} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{q_{ij}} \right] \exp \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij} - a_{ij} \sigma_{ij}} \right)$$

$$\phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}) = \lambda_{ijk} \epsilon_{ijk} [\cos \theta_{ijk} - \cos \theta_{0ijk}]^2 \exp \left(\frac{\gamma_{ij} \sigma_{ij}}{r_{ij} - a_{ij} \sigma_{ij}} \right) \exp \left(\frac{\gamma_{ik} \sigma_{ik}}{r_{ik} - a_{ik} \sigma_{ik}} \right)$$

انواع پتانسیل های جفت جفت

• پتانسیل ترسوف

J. Tersoff, Phys Rev B, 37, 6991 (1988)

– توانایی توصیف حالات مختلف تشکیل باند اتم با پارامترهای ثابت

– کاربرد گسترده در مدل سازی ساختارهای کربنی و سیلیکونی

– فایل های پتانسیل ترسوف موجود در لمپس

Si.tersoff

SiC.tersoff

SiC.tersoff.zbl

SiC_Erhart_albe.tersoff

SiCGe.tersoff

SiO.tersoff

GaN.tersoff

از آخرین تصحیحات انجام شده بر پتانسیل ترسوف

L. Lindsay و D. A. Broido و **Phys. Rev. B 81, 205441 (2010)**

انواع پتانسیل های جفت جفت

• فرمولاسیون پتانسیل ترسوف

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V_{ij}$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})]$$

$$f_c(r) = \begin{cases} 1 & : r < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi r - R}{2D}\right) & : R - D < r < R + D \\ 0 & : r > R + D \end{cases}$$

$$f_R(r) = A \exp(-\lambda_1 r)$$

$$f_A(r) = -B \exp(-\lambda_2 r)$$

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{-\frac{1}{2n}}$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp[\lambda_3^m (r_{ij} - r_{ik})^m]$$

$$g(\theta) = \gamma_{ijk} \left(1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{[d^2 + (\cos\theta - \cos\theta_0)^2]} \right)$$

شعاع
cutoff

انواع پتانسیل های pair_style

- پتانسیل AIREBO (Stuart, Tutein, Harrison, J Chem Phys, 112, 6472–6486 (2000))

– مدل سازی سیستم های کربن و هیدروژن

- پتانسیل EAM (Daw, Baskes, Phys Rev Lett, 50, 1285 (1983))

– مدل سازی فلزات و انواع آلیاژهای فلزی

- پتانسیل MEAM (Baskes, Phys Rev B, 46, 2727–2742 (1992))

– در نظر گرفتن نیروهای زاویه ای

– مدلسازی فزلات و آلیاژها با ساختار fcc، bcc، hcp و الماسی

– مواد دیگر با ساختار کووالانی مانند سیلیکون و کربن

نحوه اعمال پتانسیل های pair_style

- مشخص نمودن نوع بر هم کنش با دستور pair_style
- pair_style tersoff
- اگر ضرایب بر هم کنش در فایلی موجود هستند، آدرس آن را به دستور pair coeff می دهیم.
- pair_coeff * * SiC.tersoff Si C Si
- و یا،
- pair_coeff * * SiC.tersoff Si NULL Si

با تشکر از توجه شما

?