

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПАКЕТЕ LAMMPS**

Учебно-методическое пособие

Составители:
Д. С. Куцова, Е. В. Богатиков,
А. Н. Шебанов

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2018

Содержание

1. Введение	4
2. Подготовка данных для молекулярно-динамического моделирования	5
2.1. Структура data-файлов.....	6
2.2. Создание нанотрубки	11
2.3. Создание молекулы водорода	20
2.4. Создание общей системы углеродная нанотрубка-водород	22
2.5. Разработка управляющего скрипта для проведения расчетов.....	30
2.6. Описание переменных в управляющем скрипте LAMMPS.....	35
2.7. Запуск управляющего скрипта LAMMPS и выходные данные.....	39
3. Практические задания	40
Список литературы.....	42

простых систем, обладающих кристаллографической симметрией возможно описание геометрии моделируемой системы. Также возможно описание простейших потенциалов полностью в управляющем скрипте.

- 2) Файл с данными о геометрии моделируемой системы, в т.ч. о типах атомов и связях между атомами. Для сложных систем создание такого файла обычно требует привлечения различных утилит.
- 3) Файлы с описанием коэффициентов сложных потенциалов взаимодействия.

2.1. Структура data-файлов

Для системы, содержащей в своем составе углеродную нанотрубку, окруженную молекулами водорода, необходима разработка файла с данными о геометрии моделируемой системы - т.н. data-файла.

Структура data-файла представляет собой набор секций, описывающих систему. Они отделены друг от друга пустыми строками и имеют заголовки (кроме первых трех). Заметим, что наличие пустых строк очень важно, их нельзя удалять, иначе возникнут ошибки при работе LAMMPS. Отступы и пробелы имеют значение лишь в строках-заголовках секций. Ключевые слова (т.е. заголовки секций, например, "Masses") должны выравниваться по левому краю без отступа, начинаться с прописной буквы.

Ниже приведен пример структуры простейшего data-файла (в скобках представлены комментарии к соответствующим строкам, символ "..." заменяет длинные секции):

LAMMPS Description	(1я строка файла)
100 atoms	(эта строка должна быть 3-я, первые две линии игнорируются)
95 bonds	(кол-во связей для моделирования)

50 angles (...)

30 dihedrals (эти строки включаются, даже если соответствующие числа = 0)

20 impropers

5 atom types (кол-во несвязанных типов атомов)

10 bond types (кол-во 2-х атомных связей = набору коэффициентов связей)

18 angle types

20 dihedral types

2 improper types

-0.5 0.5 xlo xhi (для периодических систем – границы ячейки моделирования)

-0.5 0.5 ylo yhi (для неперiodических систем – min/max координаты атомов)

-0.5 0.5 zlo zhi (эта строка не включается для 2-х мерного моделирования)

Masses

1 mass

...

N mass (N = кол-во типов атомов)

Nonbond Coeffs

1 coeff1 coeff2 ...

...

N coeff1 coeff2 ... (N = кол-во типов атомов)

Bond Coeffs

1 coeff1 coeff2 ...

...

N coeff1 coeff2 ... (N = кол-во типов 2-х атомных связей)

Angle Coeffs

1 coeff1 coeff2 ...

...

N coeff1 coeff2 ... (N = кол-во типов линейных углов)

...

Atoms

1 molecule-tag atom-type q x y z nx ny nz

...

N molecule-tag atom-type q x y z nx ny nz

Velocities

1 vx vy vz

...

...

N vx vy vz

Bonds

1 bond-type atom-1 atom-2

...

N bond-type atom-1 atom-2

Angles

1 angle-type atom-1 atom-2 atom-3

...

N angle-type atom-1 atom-2 atom-3

...

Первая секция, так называемой заголовок, включает три подраздела:

1) общая статистика количества атомов и различных связей между ними (двух- и многоатомных); 2) статистика типов атомов и типов различных связей; 3) границы моделируемой системы.

Заголовочная секция должна быть первой в файле, остальные – практически в произвольном порядке. Единственное ограничение: разделы Velocities, Bonds, Angles могут быть описаны только после секции Atoms.

Всегда обязательно присутствие только следующих секций: заголовочной, Masses (описание масс атомов) и Atoms (описание координат атомов), – а также секции Bonds, Angles, Dihedrals, Impropers при условии, что в заголовочном разделе указано соответствующее ненулевое количество параметров.

Секции описания коэффициентов для силовых полей могут быть опущены. В этом случае их необходимо описать в сценарии МД моделирования.

В разделе Nonbond Coeffs каждая строка соответствует своему типу атомов. Указанные здесь коэффициенты описывают только взаимодействие между двумя атомами одного типа. Коэффициенты несвязывающего взаимодействия для разных типов атомов можно проинициализировать двумя способами. В первом они вычисляются по специальному правилу смешивания, тип которого указывается в сценарии моделирования для LAMMPS. Во втором – указываются явным образом опять же в тексте сценария моделирования с помощью специальной команды.

В секции Atoms атомы могут описываться в любом порядке для указанных N значений. Первое число в каждой строке – идентификационный номер атома, используемый при моделировании. Второе число строки – идентификационный номер молекулы (*molecule-tag*), которой принадлежит данный атом. Параметр q – это заряд атома. За единицу принимается заряд протона. Отметим, что столбцы описания номера молекулы и заряда атома могут отсутствовать или принимать нулевые значения. Их наличие зависит от необходимости использования указанных величин в процессе моделирования и корректируется способом создания data-файла. Значения x, y, z описывают начальное положение атома в Декартовой системе координат. В случае двумерного моделирования для параметра z нужно указать значение 0.

Последние 3 значения секции Atoms – nx , ny , nz – указываются факультативно. LAMMPS считывает их только тогда, когда используется команда "true flag" в сценарии моделирования. В любом другом случае LAMMPS присваивает этим параметрам нулевые значения. Их смысл заключается в том, что для каждого направления x, y, z прибавляется указанное количество n длин соответствующего размера ячейки моделирования для получения "истинных" положений атомов. Это так называемые "развернутые" координаты, которые были бы получены, если бы моделируемое пространство не было ограничено периодическими границами, которые атом может неоднократно пересекать в процессе моделирования. Такие координаты могут быть полезны для подготовки входных данных, либо для обработки результатов моделирования молекул, состоящих из длинных цепочек атомов (чтобы не нарушалась целостность молекулы, "разорванной" при пересечении границы ячейки моделирования). Значения nx , ny , nz могут быть положительными, отрицательными и нулевыми. Для двумерного моделирования нужно указать $nz = 0$.

В разделе Velocities атомы могут описываться в любом порядке, но их количество должно совпадать с количеством атомов. Другими словами, нельзя указать скорости только для части атомов. Данный раздел может отсутствовать. При этом проекции скоростей всех атомов инициализируются нулевым значением. Первая позиция в каждой строке этой секции – идентификационный номер атома в соответствии с разделом Atoms.

В процессе моделирования с периодическими граничными условиями координаты x , y , z переназначаются таким образом, чтобы они попадали в границы ячейки моделирования. Начальные координаты также не должны выходить за пределы границ моделирования. Значения nx , ny , nz будут соответствующим образом скорректированы с помощью такого переназначения.