

با سلام

مقاله ای رو براتون میفرستم که در آن از یک روش ترکیبی جهت محاسبه احتمال باز ترکیب یون ها استفاده کرده است. دو فاز محاسبه وجود دارد: دینامیک مولکولی جهت تعیین ضرایب پخش و سایر پارامترها و دیگری حل معادله پخش گاز. درخواست من انجام دینامیک مولکولی با کد لمپس است. فیزیک مسئله را توضیح می دهم تا ذهن شما به آن نزدیک شود البته باید مقاله را حتما بخوانید تاجزییات مورد نیاز برای محاسبات مشخص شوند. در نهایت معادله پخش برای یک آشکارساز گازی حل می شود. از روش کره محدود کننده استفاده شده است. به طوری که یک کره مثلاً با شعاع ۶۳ نانومتر با فشار ۳۱۶ کیلوپاسکال و دمای ۳۰۰ در نظر بگیرید که از گاز نجیب و خنثی آرگون پر شده است و تعداد اتم های آن ۱۰۰۰ است. برهمکنش بین اتم های گازی نادیده گرفته می شوند. یون  $\text{NH}_4^+$  در مرکز کره قرار دارد و یون  $\text{NO}_2^-$  وارد این کره می شود. یون ها با هم برهمکنش دارند و تعدادی به بیرون پراکنده می شوند. تعدادی ممکن است برهمکنش نداشته باشند. سرعت حرارتی بین دو یون از توزیع ماکسولی تبعیت می کند و حدود ۷۰۰ متر بر ثانیه است. از آنسامبل **NVT** هم استفاده شده است. باید این فرایند شبیه سازی شود و تمام پارامترهایی که لمپس محاسبه می کند، استخراج گردد مخصوصاً ضرایب پخش. تاکید می کنم مقاله خوانده شود و به داده های ذکر شده اکتفا نشود. در نهایت فایل ورودی، خروجی ها به صورت عددی و اکسل، عکس و انیمیشن تهیه گردند. لطفاً برآورد هزینه کنید و اطلاع دهید. مولفه های سرعت

به صورت زیر معین می شوند.

$$\vec{v}_0 = (v_x, v_y, v_z) = (v_{th}, v_{th} + v_e, v_{th}),$$

and  $v_e$  is the average electrophoretic velocity at  $\delta$ ,

$$v_e = \frac{(D_i + D_j)}{k_B T} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\delta}.$$

**Calculation of the ion–ion recombination rate coefficient via a hybrid continuum molecular dynamics approach**