به نام خدا

تمرین ۱: شبیه‌سازی گاز دواتمی O2

گاز دو اتمی O2 را با استفاده از نرم‌افزار LAMMPS شبیه‌سازی کنید و رفتار آن را در شرایط دما (T=100, T=300, T=500K)و فشارهای (P=0 , P=0.1 bar) بررسی نمایید.

الف)نمودار تعادلی آن را در هر مرحله رسم نمایید.

ب) نمودار RDF و MSD را نیز رسم نمایید.

ج) نتایج نهایی را با هم مقایسه نمایید.

تنظیمات:

پتانسیل لنارد-جونز- شرایط مرزی دوره ای- TIMESTEP=0.001- TOTAL RUN = 5000 –

تمرین 2- شبیه سازی یک صفحه گرافنی

با استفاده از یک فایل ورودی حاوی مختصات صفحه ی گرافنی و فراخوانی آن در کد بر نامه لمپس، RDF وMSD آن را محاسبه کنید.

تنظیمات:

سیستم را با دمای اولیه‌ی T=300K تنظیم کنید و از ترموستات Nose-Hoover برای کنترل دما استفاده کنید.

پتانسیل TERSOFF –

تمرین 3- محاسبه نقطه ذوب آلومینیوم

ساختار FCC آلومینیوم را ایجاد کنید و از پتانسیل EAM استفاده کنید.

سیستم را به تعادل دمایی برسانید و سپس سپس دما را در چند مرحله به آرامی افزایش دهید. دماهای پیشنهادی:

1500 K -1200 K – 900 K -700 K – 500 – 300 K

در هر دما سیستم را برای ۵۰۰۰ گام زمانی اجرا کنید و مقدار انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی سیستم و RDF را رسم کنید و فرایند آن را شرح دهید.

.