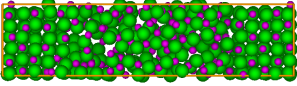
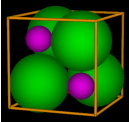
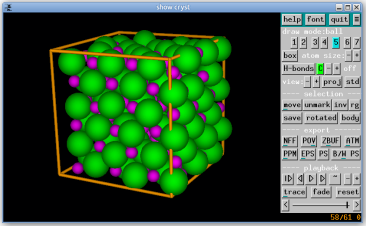
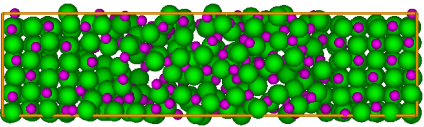
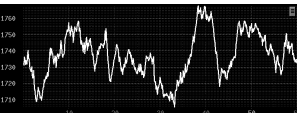


Ukázka: Bod tání modelu NaCl1/10pch3a Úkol: Stanovte bod tání modelu NaCl metodou zonální tavby (<i>slab geometry</i>) Model: Lennard-Jones + náboje¹ Postup: ● připravte nanokrystalek 2 × 2 × 2 (Na₄Cl₄) ● replikujte tento motiv 3 × 3 × 3 krát a simulujte krystal v periodických okrajových podmínkách ● stanovte hustotu a radiální distribuční funkce krystalu ● roztavte a stanovte hustotu a radiální distribuční funkce taveniny ● replikujte krystal 1 × 1 × 3 krát a roztavte polovinu boxu ● simulujte za dané teploty a sledujte, zda krystal narůstá či se taví ¹In Suk Joung and Thomas E. Cheatham, III: <i>J. Phys. Chem. B</i> 112, 9020–9041 (2008) 	A04-cr-sim.sh simulace v rovnováze6/10pch3a Spustíme simulaci s vytvořeným krystalem ještě jednou a budeme měřit. Protože simulace bude delší, bude spuštěna nikoliv na serveru, ale dávkově na některém z klientů klastru (neplatí pro a325-1). A05-cr-view.sh prohlížení výsledků ● 1=show (video trajektorie) ● 2=konvergenční profily (veličiny v závislosti na čase) ● 3=radiální distribuční funkce (kliknutím do grafu pravou myší si zobrazíte význam barev) ● 4=kumulativní distribuční funkce (running coordination number) = počet sousedů daného iontu do dané vzdálenosti (kliknutím do grafu pravou myší si zobrazíte význam barev)
A01-Na4Cl4.sh (nanokrystalek)2/10pch3a ● Úkol: Hustota modelu NaCl je 2.1 g cm⁻³, M(NaCl) = 58.4 g mol⁻¹. Vypočtete velikost hrany L krychličky obsahující Na₄Cl₄, převeďte na Å. ● Spusťte skript A01-Na4Cl4.sh a vložte vypočtené číslo do programu. Prohlédněte si vytvořený krystalek. Návod pro show: ● kontextový návod: stiskni tlačítko pravým tlačítkem myši ● kliknutí označuje molekuly (nebudete potřebovat) ● tažení rotuje a pohybuje konfigurací: – levé tlačítko: rotace okolo <i>x</i>, <i>y</i> – prostřední tlačítko: přesun – pravé tlačítko: rotace okolo <i>z</i> ● kolečko myši = zoom Start trajektorie (až budete nějakou mít): > Pokud se budete nudit: NFF nebo ZBUF + one frame + render 	A06-melt-ini.sh tavení krystalu7/10pch3a Teplota je nastavena na 1900 K. Opět sledujte, zda je systém v rovnováze. A07-melt-sim.sh simulace taveniny Simulace zrelaxované taveniny bude provedena dávkově na klastru. A08-melt-view.sh prohlížení výsledků Podobné jako v případě krystalu. (Body A06–A08 můžete přeskočit a pokračovat bodem A09.)
A02-repl.sh (příprava krystalku Na108Cl108)3/10pch3a V dalším kroku pomnožíme krystalek 3× v každém směru a necháme chvilku simulovat za teploty 300 K a tlaku 1 atm. Zařídí to skript A02-repl.sh. K tomu je potřeba jednak definice silového pole (připraví se sama), jednak definiční soubor simulace. Pro zvýšení uměleckého dojmu si ho můžete prohlédnout na následující stránce. 	A09-zone-ini.sh Příprava zonální tavby8/10pch3a ● Krystal připravený v bodech A03 až A05 bude zreplikován třikrát ve směru osy z. Výsledný krystal bude ještě trochu protažen ve směru z. ● Bude zapnut speciální typ termostatu, který bude prostředek krystalu zahřívát a „konce“ (jsou periodicky spojeny) chladit. Tím dostaneme vrstvu ve směry osy z krystalu a vrstvu taveniny (tzv. „slab geometry“). ● Velikost boxu ve směrech x a y je konstantní a dána průměrnou hodnotou ze simulace krychlového krystalu. Tento krok je opět spuštěn dávkově. Tri: strukturu lépe uvidíte, pokud použijete rovnoběžné promítání (tlačítko proj nebo =) a menší koule (view: - nebo r) 
cryst300.def – definiční soubor první simulace4/10pch3a <pre> n=108 ! pomocna promenna N[0]=n N[1]=n ! pocet Na+ a Cl- rho=2050 ! referencni hustota [kg/m3] cutoff=8.607 ! elst cutoff (pro Ewaldovu sumaci) [AA] LJcutoff=cutoff ! Lennard-Jones cutoff [AA] rdf.grid=20 ! mereni struktury (rad. distr. f.) [1/AA] el.epsk=2 el.epr=0.4 ! presnost vypoctu elst. sil [K/AA] el.diff=0.3 ! omezi urcita varovani o presnosti noint=30 h=0.1/noint ! pocet kroku/cyklus a delka kroku [ps] no=100 ! pocet cyklu dt.plb=1 ! jak casto se bude zapisovat "playback" [ps] thermostat="Andersen" ! nahodne stouchance (Maxwell-Boltzmann) T=300 ! teplota [K] (bude zmeneno) tau.=1 ! casova konstanta termostatu [ps] P=101325 ! tlak [Pa] bulkmodulus=2e13/(T+300) ! odhad modulu pruznosti (pro barostat) tau.=2 ! konstanta barostatu [ps] init="start" ! start z predch. konfig.; nove mereni a zaznam ! TOHLE BUDE SMAZANO PO PRVNIM KROKU: load.n[0]=3 ! pomnoziti 3x ve smeru x load.n[1]=3 ! pomnoziti 3x ve smeru y load.n[2]=3 ! pomnoziti 3x ve smeru z ; ! konec dat </pre>	A10-zone-sim.sh Zonální tavba9/10pch3a Konfigurace z předchozího kroku bude simulována za konstantní teploty a konstantního tlaku ve směru osy z. Ve směrech x,y se velikost simulační buňky nemění. Simulace bude spuštěna na některém z klientů klastru. A11-zone-show.sh prohlížení trajektorie Trajektorii zapisovanou běžíci simulací je možné prohlížet. Sledujte, zda krystal taje nebo narůstá. Po zavření programu show budete dotázáni, zda přerušit simulaci.
A03-cr-ini.sh (počáteční relaxace)5/10pch3a Skript se vás zeptá na teplotu, kterou dostanete od vyučujícího. Vhodný interval teplot je 1200–1400 K. Stejná teplota pak bude použita i v kroku A09. Na grafech veličin v závislosti na čase vidíme, zda máme systém zrelaxovaný do rovnováhy. Zobrazeny jsou závislosti teploty, potenciální energie a hustoty na čase. Všechny grafy zrušíte nejrychleji pomocí kill all Pokud grafy stále vykazují trend, nutno tento krok opakovat. Na dotaz „Opakovat michani s init="append"(A/n)?" odpovídáme buď a Enter nebo A Enter nebo n Enter nebo N Enter. Jak je zvykem ve světě unixu, velké A znamená default, tedy jen Enter znamená také ano. Nejpomaleji konverguje hustota; pokud se mění jen o ± 10 kg m⁻³, je to OK. 	A12-prubeh.sh Průběh tavby10/10pch3a ● Zobrazí se graf závislosti hustoty na čase pro všechny studenty na stejném počítači (po skončení simulací – musí existovat soubory T=*.cpa). ● Popis křivek dostanete kliknutím pravým tlačítkem myši. ● Výsledky pro čtyři teploty vidíte vpravo ⇒ bod tání JC modelu NaCl = 1300(25) K.³ ● Přesnější výsledek z větších simulací a s extrapolací <i>N</i> → ∞ je 1287(3) K.^a ^aV závorce je odhad standardní chyby. 