

Úkol:

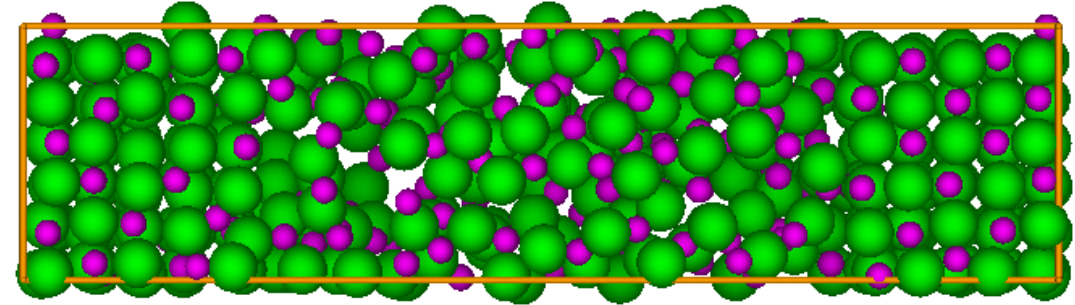
Stanovte bod tání modelu NaCl metodou zonální tavby (*slab geometry*)

Model:

Lennard-Jones + náboje¹

Postup:

- připravte nanokrystalek $2 \times 2 \times 2$ (Na_4Cl_4)
- replikujte tento motiv $3 \times 3 \times 3$ krát a simulujte krystal v periodických okrajových podmínkách
- stanovte hustotu a radiální distribuční funkce krystalu
- roztavte a stanovte hustotu a radiální distribuční funkci taveniny
- replikujte krystal $1 \times 1 \times 3$ krát a roztavte polovinu boxu
- simulujte za dané teploty a sledujte, zda krystal narůstá či se taví



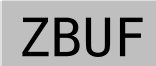
¹In Suk Joung and Thomas E. Cheatham, III: *J. Phys. Chem. B* **112**, 9020–9041 (2008)

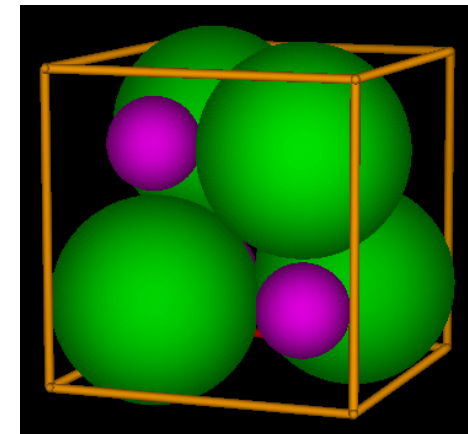
- **Úkol:** Hustota modelu NaCl je 2.1 g cm^{-3} , $M(\text{NaCl}) = 58.4 \text{ g mol}^{-1}$. Vypočtete velikost hrany L krychličky obsahující Na_4Cl_4 , převed'te na Å.
- Spust'te skript [A01-Na4Cl4.sh](#) a vložte vypočtené číslo do programu. Prohlédněte si vytvořený krystalek.

Návod pro show:

- kontextový návod: stiskni tlačítko  pravým tlačítkem myši
- kliknutí označuje molekuly (nebudete potřebovat)
- tažení rotuje a pohybuje konfigurací:
 - levé tlačítko: rotace okolo $\hat{x}$, $\hat{y}$
 - prostřední tlačítko: přesun
 - pravé tlačítko: rotace okolo $\hat{z}$
- kolečko myši = zoom

Start trajektorie (až budete nějakou mít): 

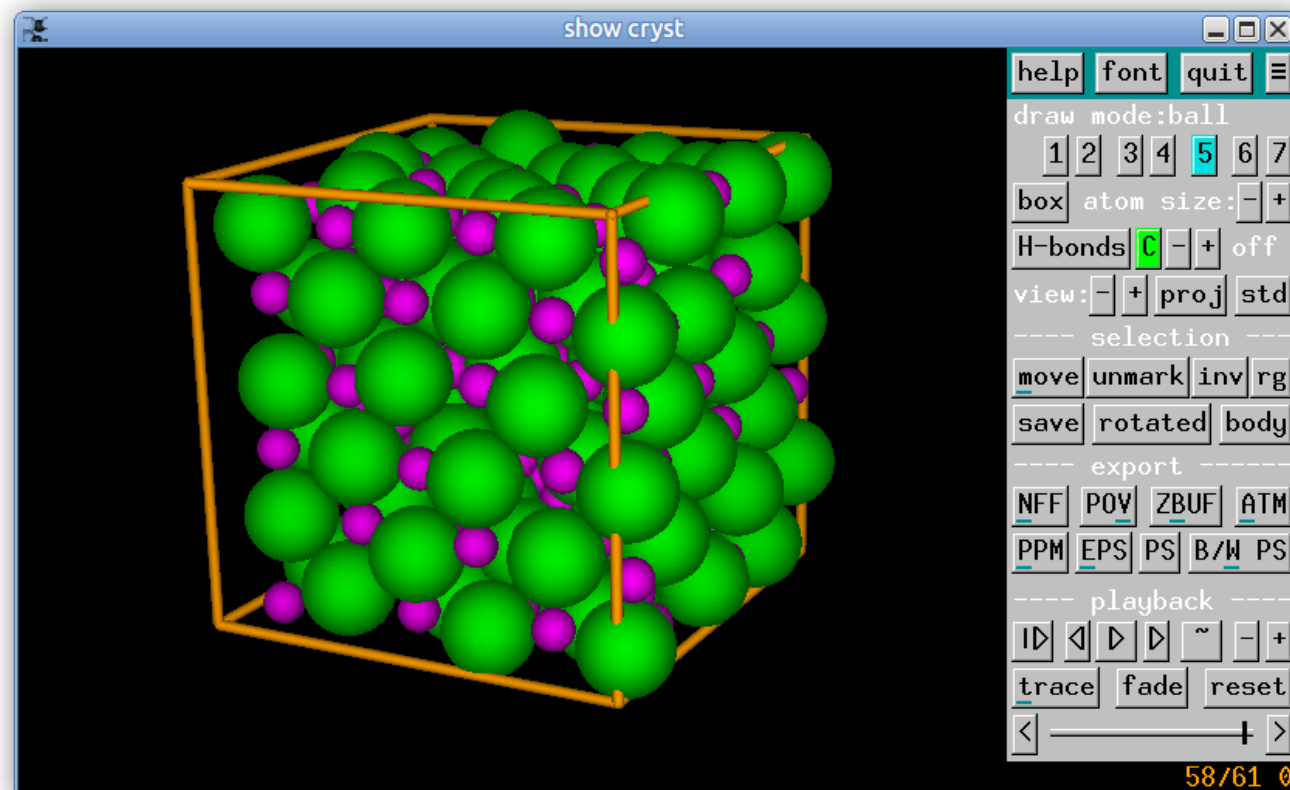
Pokud se budete nudit:  nebo  + 



V dalším kroku pomnožíme krystalek 3× v každém směru a necháme chvíli 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.



cryst300.def – definiční soubor první simulace

4/10
pch3a

```
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.epsr=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.T=1              ! casova konstanta termostatu [ps]

P=101325             ! tlak [Pa]
bulkmodulus=2e13/(T+300) ! odhad modulu pruznosti (pro barostat)
tau.P=2              ! konstanta barostatu [ps]

init="start"         ! start z predch. konfigur.; nove mereni a zaznam

! TOHLE BUDE SMAZANO PO PRVNIM KROKU:
load.n[0]=3          ! pomnozit 3x ve smeru x
load.n[1]=3          ! pomnozit 3x ve smeru y
load.n[2]=3          ! pomnozit 3x ve smeru z
;                    ! konec dat
```

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.

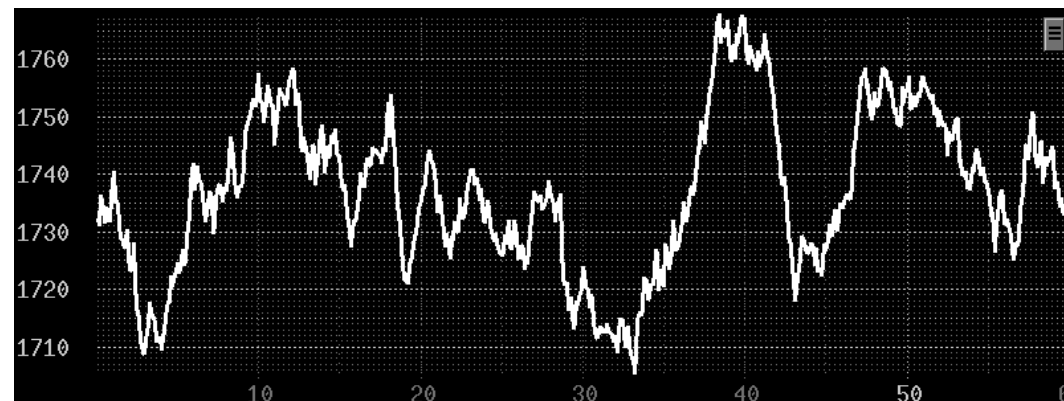
Všechny grafy zrušíte nejrychleji pomocí `kill all`

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 $\pm 10 \text{ kg m}^{-3}$, je to OK.



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)

A06-melt-ini.sh **tavení krystalu**

7/10
pch3a

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**

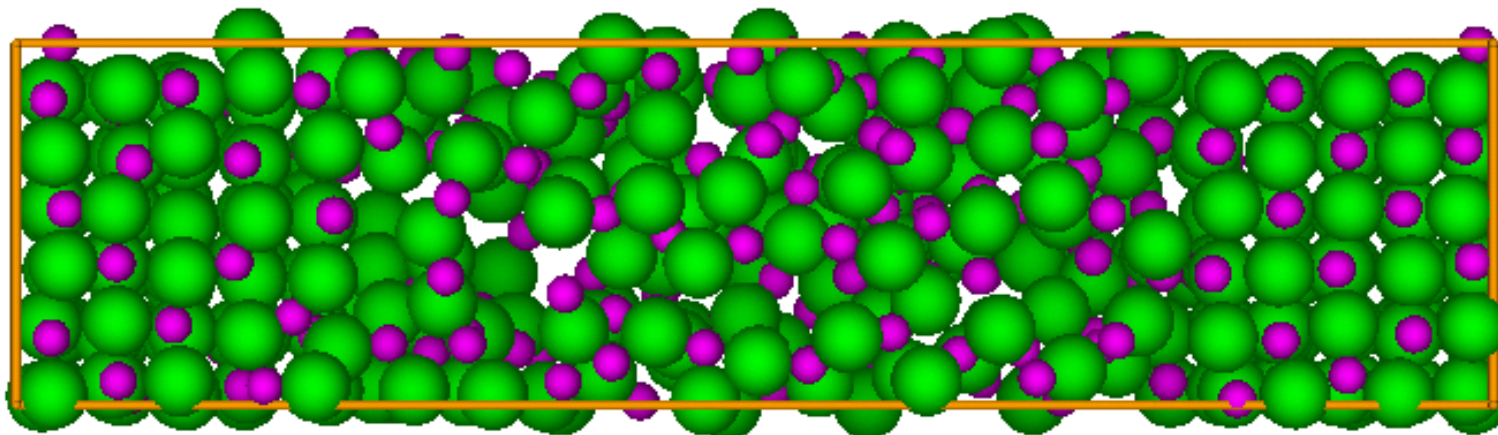
Podobné jako v případě krystalu.

(Body A06–A08 můžete přeskočit a pokračovat bodem A09.)

- 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 zahřívat a „konce“ (jsou periodicky spojeny) chladit. Tím dostaneme vrstvu ve směru osy z krystalu a vrstvu taveniny (tzv. „slab geometry“).
- Velikost boxu ve směrech x a y je konstatní a dána průměrnou hodnotou ze simulace krychlového krystalu.

Tento krok je opět spuštěn dávkově.

Trik: strukturu lépe uvidíte, pokud použijete rovnoběžné promítání (tlačítko `proj` nebo `=`) a menší koule (view: `-` nebo `r`)



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 běžící simulací je možné prohlížet.

Sledujte, zda krystal taje nebo narůstá.

Po zavření programu show budete dotázáni, zda přerušit simulaci.

- Zobrazí se graf závislosti hustoty na čase pro všechny studenty na stejném počítači (po skončení simulací – musí existovat soubory `T=*.cpa`).
- Popis křivek dostaneš kliknutím pravým tlačítkem myši.
- Výsledky pro čtyři teploty vidíte vpravo $\Rightarrow$ bod tání JC modelu NaCl = 1300(25) K.³
- Přesnější výsledek z větších simulací a s extrapolací $N \rightarrow \infty$ je 1287(3) K.^a

^aV závorce je odhad standardní chyby.

