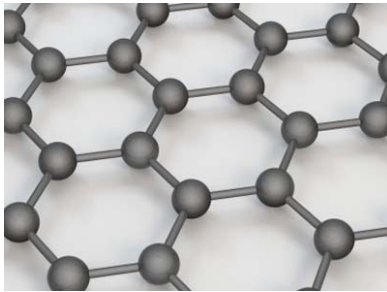


### Εργαστηριακή άσκηση

Ιδιότητες μετάλλων από προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής



Δ.Γ. Παπαγεωργίου

- LAMMPS: Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator  
<http://lammps.sandia.gov/>
- VMD: Visual Molecular Dynamics  
<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
- GNUPLOT  
<http://www.gnuplot.info/>

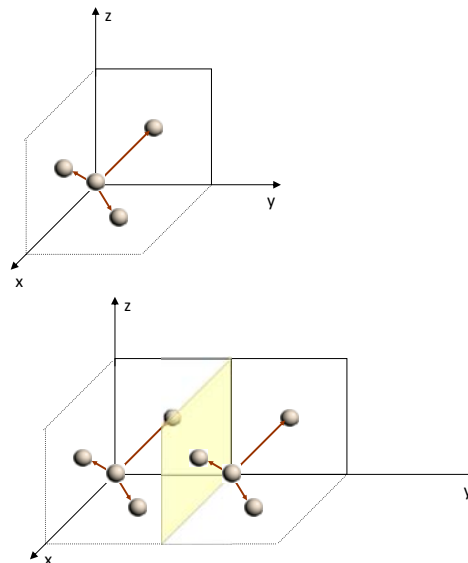
## Σύστημα υπό μελέτη

### Κρυσταλλικός χαλκός fcc

- Η μοναδιαία κυψελίδα του κρυστάλλου fcc κατασκευάζεται τοποθετώντας άτομα σε τέσσερις θέσεις της μοναδιαίας κυψελίδας:

0	0	0
0	1/2	1/2
1/2	0	1/2
1/2	1/2	0

- Το συνολικό σύστημα κατασκευάζεται από επανάληψη της μοναδιαίας κυψελίδας στις τρεις διευθύνσεις.
- Παρατηρείστε ότι τα τελευταία άτομα απέχουν 1/2 από το τέλος της κυψελίδας.



## Απαραίτητα αρχεία

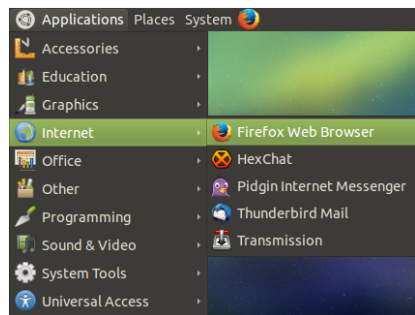
### Απαραίτητα αρχεία:

- Αρχείο δυναμικού EAM για τον χαλκό (Cu.eam)  
*Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, S.M. Foiles, M.I. Baskes and M.S. Daw, Phys. Rev. B 33, 7983 (1986).*
- Αρχείο εισόδου για το LAMMPS (md.in)

### Διαθέσιμα από την ιστοσελίδα:

<http://pc164.materials.uoi.gr/dpapageo/courses/advcomp/>

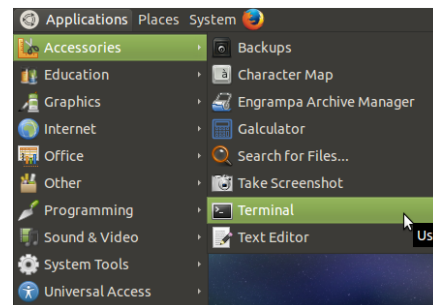
## Κατέβασμα των αρχείων



Ιστοσελίδα

<http://pc164.materials.uoi.gr/dpapageo/courses/advcomp/>

## Άνοιγμα "Terminal" για εντολές



## Διεξαγωγή της προσομοίωσης (LAMMPS)

`lmp < md.in` ← Αρχείο εισόδου LAMMPS

Αποτέλεσμα στην οθόνη:

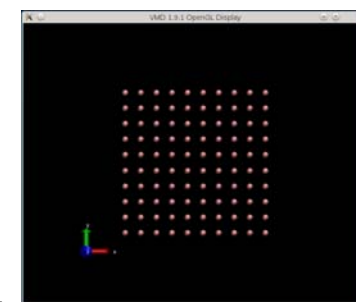
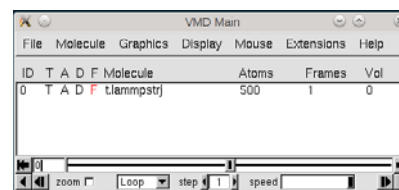
```
LAMMPS (14 Jul 2011)
Lattice spacing in x,y,z = 3.63 3.63 3.63
Created orthogonal box = (0 0 0) to (18.15 18.15 18.15)
  1 by 1 by 1 processor grid
Created 500 atoms
Displacing atoms ...
Setting up run ...
Memory usage per processor = 2.29945 Mbytes
Step Temp PotEng Press Lx Ly Lz
  0          600    -1769.6098    -9838.595    18.15    18.15    18.15
Loop time of 9.53674e-07 on 1 procs for 0 steps with 500 atoms
```

Άλλα αρχεία που δημιουργούνται:

- `t.lampstrj` αρχείο τροχιάς
- `log.lammps` αρχείο καταγραφής

## Οπτικοποίηση αποτελεσμάτων (vmd)

`vmd t.lampstrj` ← Αρχείο τροχιάς



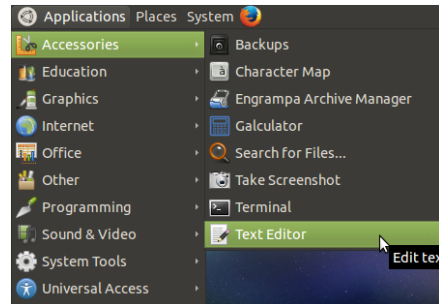
Βασικές ενέργειες:

Display → Orthographic

Graphics → Representations → Drawing Method → CPK

Στο τερματικό: `pbx box`

## Επιθεώρηση του αρχείου md.in



- Ενεργοποιούμε τον **Text Editor**
- Ανοίγουμε (**Open**) το αρχείο **md.in**

## Εξαγωγή αποτελεσμάτων από το αρχείο καταγραφής

Μόλις τελειώσει η προσομοίωση μπορούμε να εξάγουμε αριθμητικά αποτελέσματα από το αρχείο καταγραφής `log.lammps`

```
thermo_extract -p Temp -s log.lammps > t
```

← Αρχείο στο οποίο θα γραφεί

↑  
Ιδιότητα που θέλω να εξάγω

Άλλες ιδιότητες:

RotEng Δυναμική ενέργεια  
Press Πίεση  
Lx Διάσταση κουτιού στον άξονα x  
Ly Διάσταση κουτιού στον άξονα y  
Lz Διάσταση κουτιού στον άξονα z

```
0 600.000000
1 575.298190
2 532.455650
3 491.261280
4 445.607810
5 400.711620
6 358.590150
7 319.799140
8 284.727670
9 253.682610
```

↖ Χρονικό βήμα      ↗ Θερμοκρασία

## Γραφική παράσταση με το Gnuplot

```
gnuplot
gnuplot> plot 't' u 1:2 w l
```

't' Αρχείο με δεδομένα  
u 1:2 Ποιές στήλες να χρησιμοποιηθούν για τους άξονες x και y  
w l Τα σημεία να ενωθούν με γραμμές

```
gnuplot> exit
```

← Έξοδος από το gnuplot

## Μέση τιμή θερμοκρασίας

```
avg 2 10001 20000 < t
```

2 Στήλη  
10001 Η άθροιση ξεκινά από αυτή τη γραμμή  
20000 Η άθροιση τελειώνει σε αυτή τη γραμμή  
t Αρχείο εισόδου

Αποτέλεσμα στην οθόνη:

```
Number of data: 10000
Average: 300.02623594499897
```

## Πίεση

```
thermo_extract -p Press -s log.lammps > p
```

Εξαγωγή από το αρχείο καταγραφής

```
gnuplot  
gnuplot> plot 'p' u 1:2 w l  
gnuplot> exit
```

Γραφική παράσταση

```
avg 2 10001 20000 < p
```

Μέση τιμή

## Δυναμική ενέργεια

```
thermo_extract -p PotEng -s log.lammps > e
```

Εξαγωγή από το αρχείο καταγραφής

```
gnuplot  
gnuplot> plot 'e' u 1:2 w l  
gnuplot> exit
```

Γραφική παράσταση

```
avg 2 10001 20000 < e
```

Μέση τιμή

Μπορούμε να υπολογίσουμε την ενέργεια συνοχής του μετάλλου διαιρώντας τη μέση τιμή της δυναμικής ενέργειας με το πλήθος των ατόμων.

Η πειραματική τιμή δίνεται στο [www.webelements.com](http://www.webelements.com) ως **Enthalpy of atomization**

## Μέγεθος κουτιού προσομοίωσης

```
thermo_extract -p Lx -s log.lammps > x
```

Εξαγωγή από το αρχείο καταγραφής

```
gnuplot  
gnuplot> plot 'x' u 1:2 w l  
gnuplot> exit
```

Γραφική παράσταση

```
avg 2 10001 20000 < x
```

Μέση τιμή

Μπορούμε να υπολογίσουμε την πλεγματική σταθερά διαιρώντας με το πλήθος των μοναδιαίων κυψελίδων.

Η πειραματική τιμή δίνεται στο [www.webelements.com](http://www.webelements.com) στο **Crystal structure**.

## Πυκνότητα

Αφού βρήκαμε τις διαστάσεις του κουτιού μπορούμε να υπολογίσουμε την πυκνότητα :

$$\rho = \frac{m}{V}$$

Η πειραματική τιμή δίνεται στο [www.webelements.com](http://www.webelements.com) στο **Physical properties** → **Density of solid**.

## Θερμική διαστολή



$$\Delta L = aL_0\Delta T \rightarrow a = \frac{1}{L_0} \frac{\Delta L}{\Delta T}$$

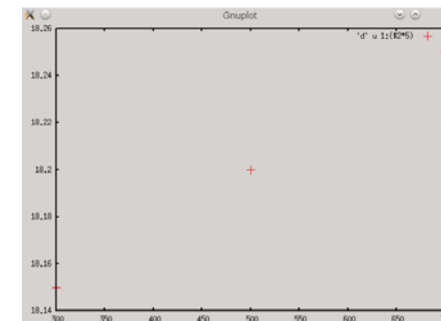
## Θερμική διαστολή

Επαναλαμβάνουμε την προσομοίωση και για άλλες θερμοκρασίες

T (K)	Μέγεθος κουτιού (Å)
300	
500	
700	

Γραφική παράσταση με το gnuplot

```
gnuplot  
gnuplot> plot 'd' u 1:2 w l
```



Η κλίση της βέλτιστης ευθείας που περνά από τα σημεία αποτελεί τον παράγοντα  $\Delta L/\Delta T$ .

## Προσαρμογή ελαχίστων τετραγώνων με το gnuplot

```
gnuplot          Ενεργοποίηση του gnuplot  
gnuplot> f(x)=a*x+b  Ορισμός της συνάρτησης  
gnuplot> a=1        Αρχική τιμή για το a  
gnuplot> b=1        Αρχική τιμή για το b  
gnuplot> fit f(x) 'd' via a,b  Προσαρμογή ελαχίστων τετραγώνων
```

Final set of parameters	Asymptotic Standard Error
=====	=====
a = 0.00032448	+/- 6.663e-06 (2.053%)
b = 18.0658	+/- 0.003505 (0.0194%)

```
gnuplot> plot 'd', f(x)  Γραφική παράσταση  
gnuplot> exit           Έξοδος από το gnuplot
```

Η πειραματική τιμή δίνεται στο [www.webelements.com](http://www.webelements.com) στο  
[Physical properties](#) → Coefficient of linear thermal expansion.