

do zdobycia: [60 pkt]

deadline: 11 I 2012

Zestaw 6

Niezbędne zasoby:

- zestaw przykładowych plików wejściowych do symulacji rozciągania nanopręta miedzianego znaleźć można w archiwum `~swinczew/nano_obl/breaking_done.tar`
- omówienie nowych dyrektyw (`types`, `collect_pRDF`, `zero_lmom`, `zero_amom`, `veloc` oraz `fixed`) oraz ogólnych idei symulacji nierównowagowych – na tablicy.

Zadania:

1. Napisać program generujący (poprzez proste wycięcie walca z objętościowej formy materiału) konfigurację nanopręta wybranego metalu. Niech na wejściu program pobiera następujące parametry:

- długość L nanopręta,
- promień R nanopręta,
- stałą sieciową a_0 oraz symbol chemiczny Xx pierwiastka, z którego ma zostać wykonany nanopręt,
- nazwę pliku wyjściowego (o formacie `xyz`), do którego mają zostać zapisane rezultaty.

Niech kierunek głównej osi nanopręta będzie zgodny z osią OZ . Ponadto niech atomom zlokalizowanym w obrębie końców nanopręta program przypisuje następujące symbole:

- Xx_1 w przypadku atomów zlokalizowanych na lewym końcu, tj. w okolicy $z = 0$,
- Xx_2 w przypadku atomów zlokalizowanych na prawym końcu, tj. w okolicy $z = L$.

Niech program automatycznie (patrz: zadane wartości promienia R oraz długości L) ustala parametry pudła symulacyjnego, tak by definiowany nanopręt był swobodny. [16pkt]

2. Korzystając ze stworzonego programu wygenerować sześć przykładowych nanoprętów (trzy nanopręty o równych średnicach i różnych długościach, trzy nanopręty o równych długościach i różnych średnicach). Uzyskane struktury przedstawić za pomocą programu VMD. Jak liczba atomów stanowiących nanopręt zależy od jego promienia R oraz jego długości L ? [4pkt]

3. Przeprowadzić symulację rozciągania i zrywania nanopręta wybranego metalu (wyłączając Cu). Niech symulowany nanopręt posiada długość nie mniejszą aniżeli $L = 100 \text{ \AA}$. Promień nanopręta dobrać tak, by był on stanowiony przez 2000 – 3000 atomów. Niech:

- do opisu oddziaływań zostanie użyty potencjał Suttona-Chena,
- krok czasowy będzie równy $h = 2 \text{ fs}$,
- symulacja trwa $N_{steps} = 50000$ kroków,
- symulacja przebiega w temperaturze $T = 300 \text{ K}$, przez początkowe $N_{scale} = 1000$ kroków ma miejsce (co 50 krok) skalowanie prędkości do temperatury, po okresie równoważenia ma miejsce termostatowanie,
- zerowany będzie całkowity pęd oraz całkowity moment pędu układu,

Niech atomy stanowiące końce nanopręta będą w trakcie symulacji poruszane ze stałą prędkością v . Wartość (oraz zwroty) v dobrać tak by w trakcie całej symulacji układ został odkształcony do $\epsilon = 0.15 - 0.25$. Ponadto zadbać o to by podczas symulacji:

- obliczone zostały – uśrednione w oparciu o informacje z 2500 kroków – radialne funkcje rozkładu $g(r)$,
- średnie parametry układu zapisane zostały z rozdzielczością 50-krokową.

4. Sporządzić i omówić przebiegi $E_{tot}(N_{step})$, $T(N_{step})$ oraz $E_{pot}(N_{step})$.

5. Sporządzić i omówić przebieg $E_{tot}(\epsilon)$.

6. Korzystając z zależności

$$Y_V = \frac{1}{V_0} \left. \frac{\partial^2 E_{tot}}{\partial \epsilon^2} \right|_{\epsilon=0} \quad (1)$$

oraz uzyskanego z symulacji przebiegu $E_{tot}(\epsilon)$ wyznaczyć moduł Younga Y_V badanego nanopręta. Rezultat wyrazić w GPa i porównać z danymi literaturowymi.

7. Sporządzić i omówić odpowiadające różnym etapom procesu rozciągania przebiegi $g(r)$, spostrzeżenia skorelować z obserwowanym zachowaniem układu (wizualizacja struktury).

8. Przygotować sprawozdanie opisujące przeprowadzone w ramach zadań 3-7 badania (styl publikacji naukowej, maksimum 8 stron, oceniana zarówno treść jak i forma). [40pkt]