

Esercizi di dinamica molecolare

Premessa

Per lo svolgimento di questi esercizi vengono forniti i seguenti script LAMMPS

Script 1 in.VV_NVE : equilibra un pezzo di c-Si con velocity-rescale e poi gira un conto NVE

Script 2 in.TRAJECTORY : genera una traiettoria atomica e ne salva il film per animazioni con il programma di visualizzazione grafica VMD (formato .xyz)

Script 3 in.NH_NVE : fa la stessa cosa di **Script 1**, ma usa il termostato di Nosè-Hoover

Script 4 in.MELT : genera un campione di silicio liquido per liquefazione da stato solido (*simulated thermal annealing*)

cui ho aggiunto il file **Si.sw** che fa parte della normale libreria di file generata dal procedimento di installazione di LAMMPS: esso contiene i parametri del potenziale di Stillinger-Weber per silicio.

Esercizio 1

- i. Leggere con la massima attenzione **Script 1** e comprendere tutte le istruzioni ivi riportate, con la relativa sintassi¹.
- ii. Eseguire lo **Script 1** ed utilizzando il suo output graficare l'energia totale e la temperatura istantanea durante il run. Spiegare il risultato.
- iii. Modificare **Script 1** portando il valore del time-step δt a $\delta t = 5\text{fs}$. Ri-eseguire il calcolo come ii., confrontando i nuovi risultati con i precedenti. Dare spiegazione delle differenze osservate.
- iv. Ripetere il calcolo iii. con $\delta t = 10\text{fs}$. Commentare il risultato.
- v. Riportare $\delta t = 1\text{fs}$ e modificare la temperatura al valore $T = 1500\text{K}$. Ri-eseguire **Script 1** e confrontare il risultato con quanto ottenuto nel caso ii. spiegando i risultati.
- vi. Ripetere il calcolo ii. dopo aver aumentato le dimensioni della cella di simulazione fino a contenere 4096 atomi. Calcolare sia nel caso ii. sia nel caso presente la deviazione standard relativa² dell'energia, limitatamente alla parte corrispondente al run NVE. Confrontare e spiegare il risultato.

Esercizio 2

- i. Leggere con la massima attenzione **Script 2** e comprendere tutte le istruzioni ivi riportate, con la relativa sintassi.
- ii. Eseguire lo **Script 2** ed utilizzando il suo output generare una animazione del run di dinamica molecolare³.
- iii. Utilizzando il programma di grafica VMD calcolare la funzione di correlazione a coppie del campione simulato.

¹ Fare uso del manuale LAMMPS per capire la sintassi dei comandi.

² La deviazione standard relativa di una grandezza è la deviazione standard diviso il valor medio della grandezza stessa.

³ Va bene un qualunque programma di visualizzazione compatibile con il formato grafici .xyz con cui è stata generata la traiettoria LAMMPS. Si consiglia, ad esempio, l'uso di VMD.

- iv. Ripetere ii. e iii. su un campione a temperatura $T=1200\text{K}$. Confrontare la funzione di correlazione a coppie con il caso precedente e commentare il risultato.

Esercizio 3

- i. Leggere con la massima attenzione **Script 3** e comprendere tutte le istruzioni ivi riportate, con la relativa sintassi.
- ii. Eseguire lo **Script 3** ed utilizzando il suo output graficare l'energia totale e la temperatura istantanea durante il run. Spiegare il risultato, soprattutto per ciò che riguarda il comportamento del sistema durante la fase di termalizzazione iniziale, e confrontarlo con quanto già ottenuto nell'Esercizio 1.
- iii. Modificare il parametro T_{damp} in **Script 3** portandolo ai valori 10.0 e 20.0 (in unità LAMPPS). Ri-eseguire **Script 3** per questi due nuovi valori di T_{damp} e confrontare/commentare i risultati ottenuti rispetto a ii.

Esercizio 4

- i. Leggere con la massima attenzione **Script 4** e comprendere tutte le istruzioni ivi riportate, con la relativa sintassi.
- ii. Eseguire lo **Script 4** verificandone il funzionamento. Successivamente modificare tale Script in modo che, dopo aver generato il campione di silicio liquido, produca una animazione.
- iii. Calcolare la funzione di correlazione a coppie del silicio liquido e confrontarla con quella del silicio cristallino. Commentare il risultato.

Esercizio 5

- i. Utilizzando **Script 4** come riferimento preparare uno **Script 5** che, partendo da un campione di silicio liquido ad alta temperatura, lo si raffreddi fino alla temperatura ambiente utilizzando il metodo del velocity-rescaling.
- ii. Una volta ri-solidificato il campione di silicio inizialmente liquido a temperatura ambiente, si esegua uno script che generi una animazione (a temperatura costante pari a quella ambientale) e si calcoli la funzione di correlazione a coppie.
- iii. Confrontare tale funzione di correlazione a coppie con quelle di silicio liquido (ad alta temperatura, cfr. Esercizio 4) e di silicio cristallino. Commentare il risultato.
- iv. Ripetere i punti i., ii. e iii. avendo avuto cura di variare il *rateo di raffreddamento*⁴ durante la fase di ri-solidificazione del campione inizialmente liquido. Ripetere questo esperimento numerico per alcuni valori molto diversi di rateo di raffreddamento e commentare i risultati ottenuti, confrontando le diverse funzioni di correlazione a coppie dei campioni così ri-solidificati.

⁴ Sia T_L la temperatura iniziale del campione liquido e T_S la temperatura finale del campione ri-solidificato a temperatura ambiente. Se lo step i. dell'Esercizio 5 è stato eseguito su N time step di dinamica molecolare, allora si definisce *rateo di raffreddamento* il rapporto $(T_L - T_S)/N$.