

# 3d Lennard-Jones Comentário (inicia-se com #)

units lj Todas as unidades são adimensionais. Veja explicação em anexo (UNITS.pdf).  
 atom\_style atomic Tipo de simulação (atômica). Casos mais complexos podem ser "molecular", etc...  
 boundary p p p Condições de contorno periódicas em xyz.

lattice fcc 0.7 O sistema será inicializado como um sólido fcc com densidade 0.7

region box block 0 5 0 5 0 5

create\_box 1 box Dentro da caixa de simulação haverá apenas 1 tipo de partícula

create\_atoms 1 box Criam-se partículas do tipo 1 dentro da caixa de simulação

mass 1 1.0 A massa das partículas tipo 1 é 1.0.

velocity all create 2.0 87287 Velocidade inicial de todas as partículas. A temperatura é 2.0.  
 A semente para o gerador de números aleatórios é 87287.

pair style lj/cut 2.5 Potencial de LJ, cortado em 2.5.

pair coeff 1 1 1.0 1.0 2.5

pair\_modify tail yes Correção de tail devido ao cutoff.

neighbor 0.3 bin

neigh\_modify every 20 delay 0 check no

Não mexam nisso...

compute tt all temp Calcula a temperatura instantanea do sistema e guarda em tt

compute pp all pressure tt Calcula a pressão e armazena em pp.

compute en all pe pair Energia potencia; guarda em en.

fix 1 all nvt 2.0 2.0 0.1

fix 5 all ave/time 100 5 500 c\_tt c\_pp c\_en file thermodynamics.dat

timestep 0.003 Auto-explicativo

thermo 1000 A cada 1000 passos, informações são impressas na tela

dump 1 all custom 500 dumpfile.dat id type x y z

run 50000

As partículas tipo 1 interagem entre si via o potencial  
 de LJ com epsilon = 1.0, sigma = 1.0, cutoff = 2.5.

50 mil passos de simulação.

A caixa de simulação terá início em 0 e fim em 5 nas  
 direções xyz, em unidades de parâmetro de rede fcc

Ensemble do sistema é NVT. T inicial = 2.0, T final  
 = 2.0 e parâmetro de dumping da temperatura =  
 0.1: quando menor este for, menos flutua a  
 temperatura.

A cada 500 passos as informações  
 "número", "tipo" e "posição xyz" de cada  
 partícula é gravada no arquivo  
 dumpfile.dat.

A cada a cada 100 passos T, P e U são  
 calculados, fazendo-se uma média  
 destes para grupos de 5 valores. A cada  
 500 passos, esta média de 5 valores é  
 impressa no arquivo  
 thermodynamics.dat.