

ריצה על קובץ 32:16 עם PBC

זמן ריצה: 2M צעדי זמן

את הריצה ביצעתי באופן ממוקבל עם 8 threads ואורכה סה"כ 13:38:53.

צעדי זמן להפוגה בסוף ותחילת הריצה- 10K

צעדי זמן להרצת הפוטנציאל הנוסף על רביעייה נבחרת- 10K

צעדי זמן להפוגה בין הפעלת הפוטנציאל על רביעיות שונות – 1K

פרמטרים של הפוטנציאל:

PAIR	O-C	N-C	H-O
F1	71	142	130
F2	0.5	1.0	1.0
R12	3.0	1.5	1.0

תוצאות:

במהלך הריצה הופעל את הפוטנציאל על 179 רביעיות, אציג את הגרפים של 25 הרביעיות בהן תהליך הצילוב הושלם ונותר יציב לאורך זמן הריצה. בסך הכל- 14.5% מהרביעיות עליהן הופעל הפוטנציאל הגיעו לריאקציה (בערך 1:7)

אילו רביעיות הגיעו לריאקציה:

84,94,99,106,108,110,137,140,144,145,153,161,166,174,176, 3,5,14,16,17,22,38,40,49,68

אם תרצי לשלוח לך קובץ המכיל את הגרפי מרחקים של כל רביעייה כתלות בזמן, שמרתי את הגרפים אך כיוון שמדובר ב-26 גרפים (שזה הרבה) לא ידעתי אם זה יהיה רלוונטי.

Species.out:

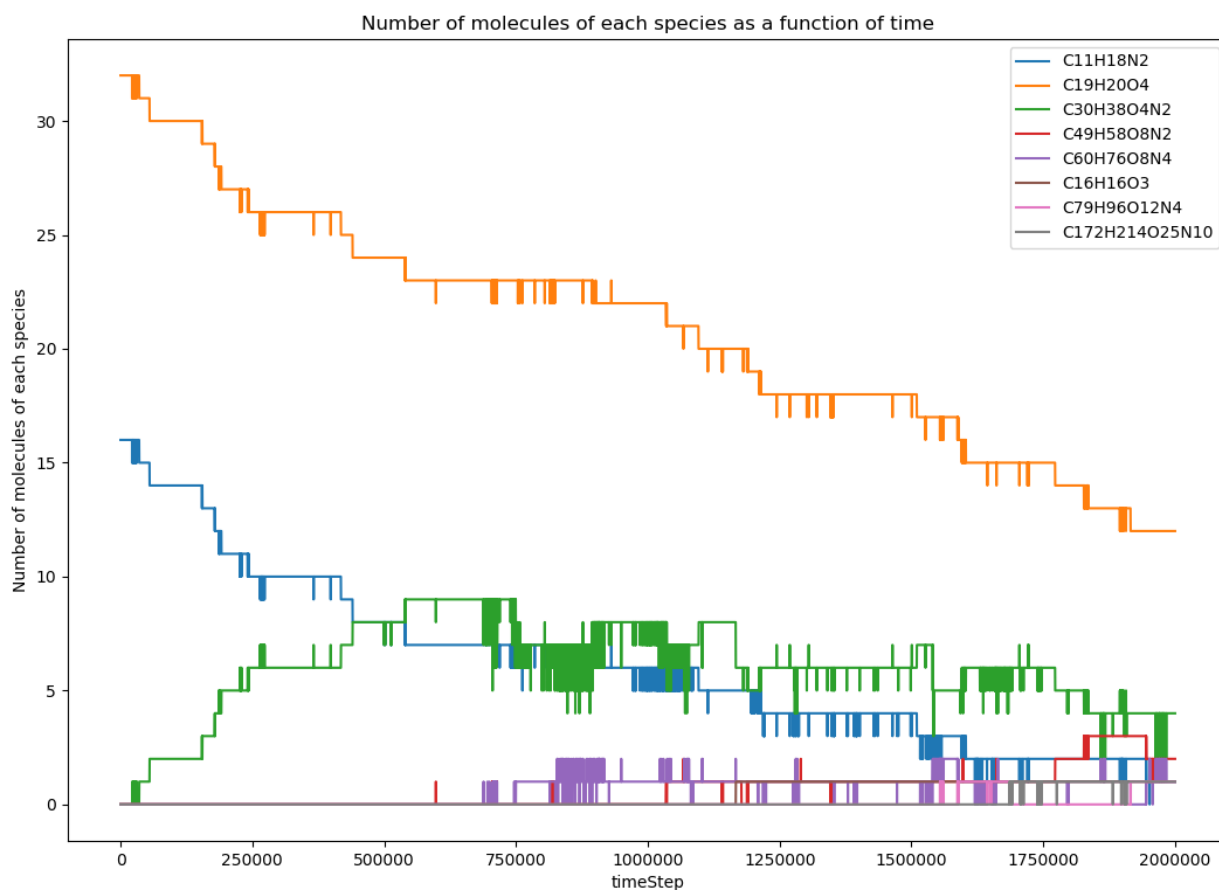
אציג רק צעדי זמן בהם התרחשו שינויים יציבים ואילו רביעיות גרמו לכך

start

# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C11H18N2	
100	48	2	32	16	
Fourset 3 : C 1311 H 1838 O 1313 N 1818 founded at 32,020					
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C30H38O4N2	C11H18N2
35400	47	3	31	1	15
Fourset 5 : C 924 H 1778 O 926 N 1757 founded at 54,040					
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C30H38O4N2	C11H18N2
55100	46	3	30	2	14
Fourset 14 : C 1139 H 1810 O 1141 N 1788 founded at 153,130					
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C30H38O4N2	C11H18N2
155200	45	3	29	3	13
Fourset 16 : C 964 H 1466 O 968 N 1446 founded at 175,150					
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C30H38O4N2	C11H18N2
179300	44	3	28	4	12
Fourset 17 : C 147 H 1562 O 151 N 1540 founded at 186,160					
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C30H38O4N2	C11H18N2
191300	43	3	27	5	11
Fourset 22 : C 709 H 1747 O 711 N 1726 founded at 241,210					
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C30H38O4N2	C11H18N2
243000	42	3	26	6	10
Fourset 38 : C 1351 H 1404 O 1355 N 1384 founded at 417,370					

# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C30H38O4N2	C11H18N2	
418200	41	3 25	7 9			
Fourset 40 : C 405 H 1500 O 409 N 1478 founded at 439,390						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C30H38O4N2	C11H18N2	
440100	40	3 24	8 8			
Fourset 49 : C 233 H 1590 O 237 N 1570 founded at 538,480						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C30H38O4N2	C11H18N2	
540200	39	3 23	9 7			
Fourset 68 : C 150 H 1407 O 152 N 1385 founded at 747,670						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C30H38O4N2	C11H18N2
749800	38	4 23	1 7	7		
Fourset 84 : C 534 H 1436 O 538 N 1415 founded at 923,830						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C30H38O4N2	C11H18N2
894500	37	4 22	1 8	6		
Fourset 94 : C 190 H 1497 O 194 N 1477 founded at 1,033,930						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C49H58O8N2	C30H38O4N2
	C11H18N2					
1036500	36	5 21	1 1	7 6		
Fourset 99 : C 748 H 1652 O 753 N 1632 founded at 1,088,980						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C49H58O8N2	C30H38O4N2
	C11H18N2					
1096500	35	5 20	1 1	8 5		
Fourset 106 : C 1137 H 1777 O 1133 N 1756 founded at 1,166,050						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C49H58O8N2	C30H38O4N2
	C44H60O5N4	C16H16O3	C11H18N2			
1166900	35	7 20	1 1	6 1	1 5	
Fourset 107 : C 408 H 1779 O 410 N 1757 founded at 1177060						
לא הגיע לריאקציה מלאה, רק הקשר N-C נוצר						
הקשרים O-C , N-H לא התפרקו, הקשר H-O לא נוצר						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C93H118O13N6C30H38O4N2	
	C16H16O3	C11H18N2				
1177600	34	6 20	1 1	6 1	5	
Fourset 108 : C 491 H 1748 O 495 N 1726 founded at 1,188,070						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C93H118O13N6C30H38O4N2	
	C49H58O8N2	C16H16O3	C11H18N2			
1188900	33	7 19	1 1	5 1	1 5	
Fourset 110 : C 1222 H 1715 O 1226 N 1694 founded at 1,210,090						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C93H118O13N6C30H38O4N2	
	C49H58O8N2	C16H16O3	C11H18N2			
1214800	32	7 18	1 1	6 1	1 4	
Fourset 137 : C 1053 H 1685 O 1055 N 1664 founded at 1,507,360						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C93H118O13N6C30H38O4N2	
	C49H58O8N2	C16H16O3	C11H18N2			
1510200	31	7 17	1 1	7 1	1 3	
Fourset 140 : C 752 H 1467 O 754 N 1446 founded at 1,540,390						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C93H118O13N6C30H38O4N2	
	C49H58O8N2	C16H16O3	C11H18N2			
1541400	30	7 17	2 1	5 1	1 3	
Fourset 144 : C 881 H 1655 O 883 N 1633 founded at 1,584,430						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C19H20O4	C60H76O8N4	C93H118O13N6C30H38O4N2	
	C49H58O8N2	C79H96O12N4	C16H16O3	C11H18N2		
1588700	29	8 16	1 1	5 1	1 3	
Fourset 145 : C 18 H 1530 O 22 N 1509 founded at 1,595,440						

# Timestep	No_Moles	No_Specs	C30H38O4N2	C19H20O4	C60H76O8N4	C93H118O13N6
			C49H58O8N2	C79H96O12N4	C16H16O3	C11H18N2
1596100	28	8 6	15	1	1	1 1 1 2
Fourset 153 : C 921 H 1654 O 925 N 1633 founded at 1,683,520						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C30H38O4N2	C19H20O4	C60H76O8N4	C172H214O25N10
			C49H58O8N2	C16H16O3	C11H18N2	
1685900	27	7 6	15	1	1	2
Fourset 161 : C 319 H 1529 O 323 N 1508 founded at 1,771,600						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C49H58O8N2	C19H20O4	C60H76O8N4	C172H214O25N10
			C30H38O4N2	C16H16O3	C11H18N2	
1772700	26	7 2	14	1	1	2
Fourset 166 : C 64 H 1592 O 66 N 1571 founded at 1,826,650						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C49H58O8N2	C19H20O4	C60H76O8N4	C172H214O25N10
			C30H38O4N2	C16H16O3	C11H18N2	
1828100	25	7 3	13	1	1	2
Fourset 174 : C 279 H 1559 O 281 N 1539 founded at 1,914,730						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C49H58O8N2	C19H20O4	C79H96O12N4	C172H214O25N10
			C30H38O4N2	C16H16O3	C11H18N2	
1915500	24	7 3	12	1	1	2
Fourset 176 : C 21 H 1622 O 23 N 1601 founded at 1,936,750						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C60H76O8N4	C49H58O8N2	C19H20O4	C79H96O12N4
			C172H214O25N10	C30H38O4N2	C16H16O3	C11H18N2
1945300	23	8 1	2	12	1	1 4 1 1
END						
# Timestep	No_Moles	No_Specs	C60H76O8N4	C49H58O8N2	C19H20O4	C79H96O12N4
			C172H214O25N10	C30H38O4N2	C16H16O3	C11H18N2
2000000	23	8 1	2	12	1	1 4 1 1



מולקולה	כמות	כמה EPON מכיל	כמה DETDA מכיל	כמה C3H4O מכיל
C60H76O8N4	1	2	2	
C49H58O8N2	2	2	1	
C19H20O4	12	1		
C79H96O12N4	1	3	2	
C172H214O25N10	1	6	5	
C30H38O4N2	4	1	1	1
C16H16O3	1	אפון מפורק		החלק החסר
C11H18N2	1		1	

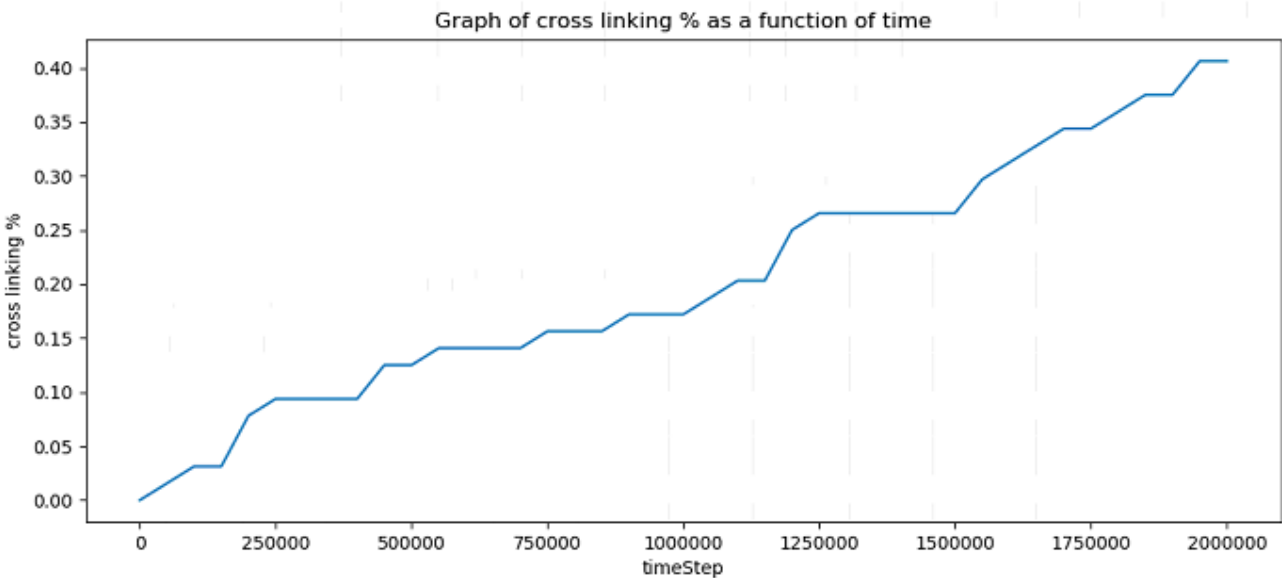
ציור באמצעות MOLVIEWER

כיוון שmol viewer לא מתחשב בתנאי שפה, הציור של הצעד זמן האחרון יצא לא ברור.
מצורפים למייל קבצי XYZ של צעד זמן ראשון ואחרון.

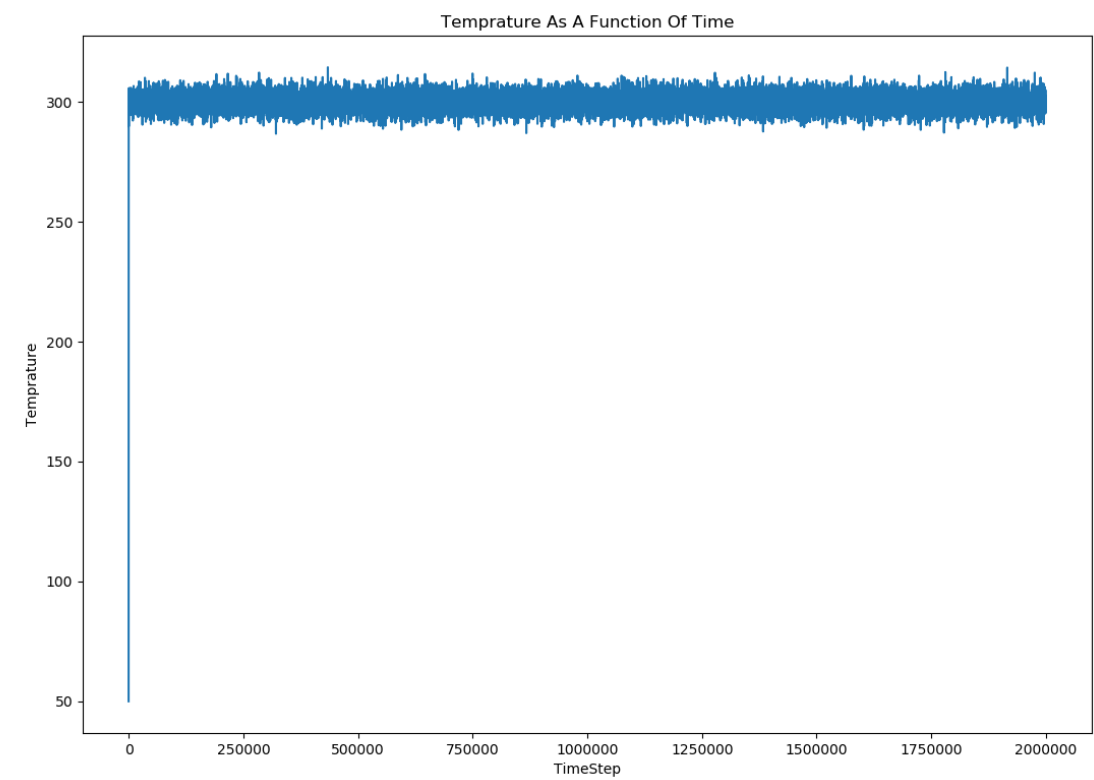
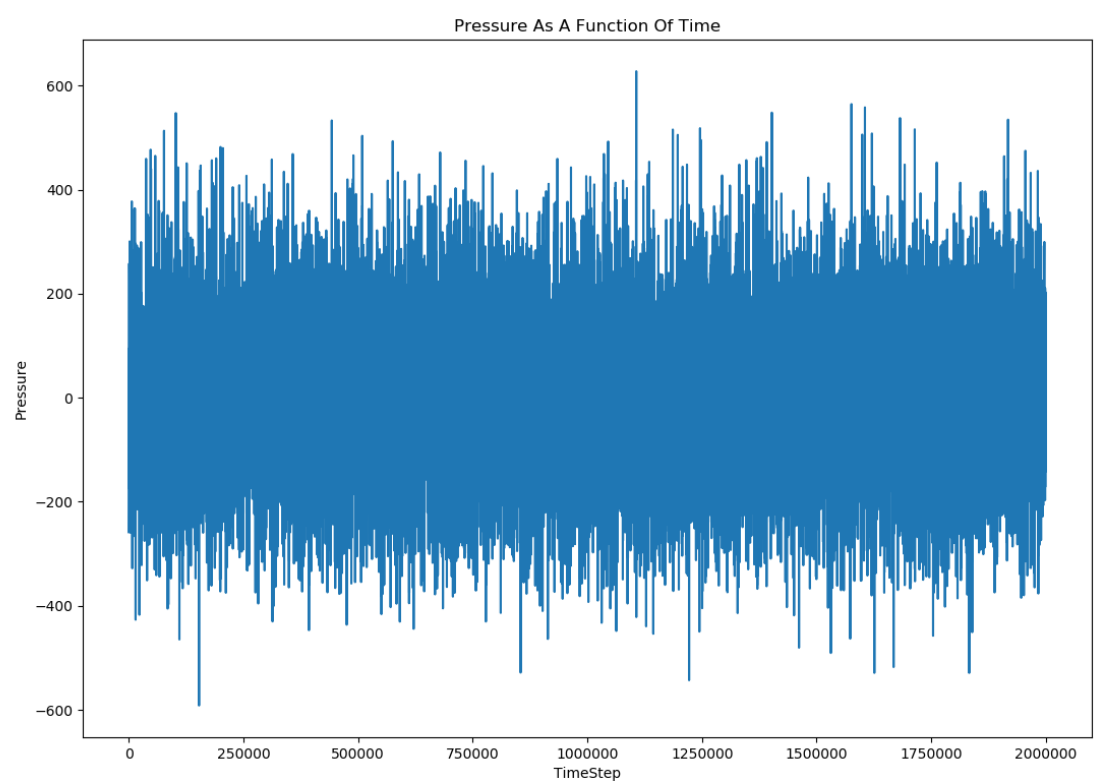
חישוב אחוז צילוב

num of N-C bond at timestep 2,000,000: 8
num of N-C bond in DETDA: 34
num of N-C created bonds: 26
num of DETDA molecules: 16

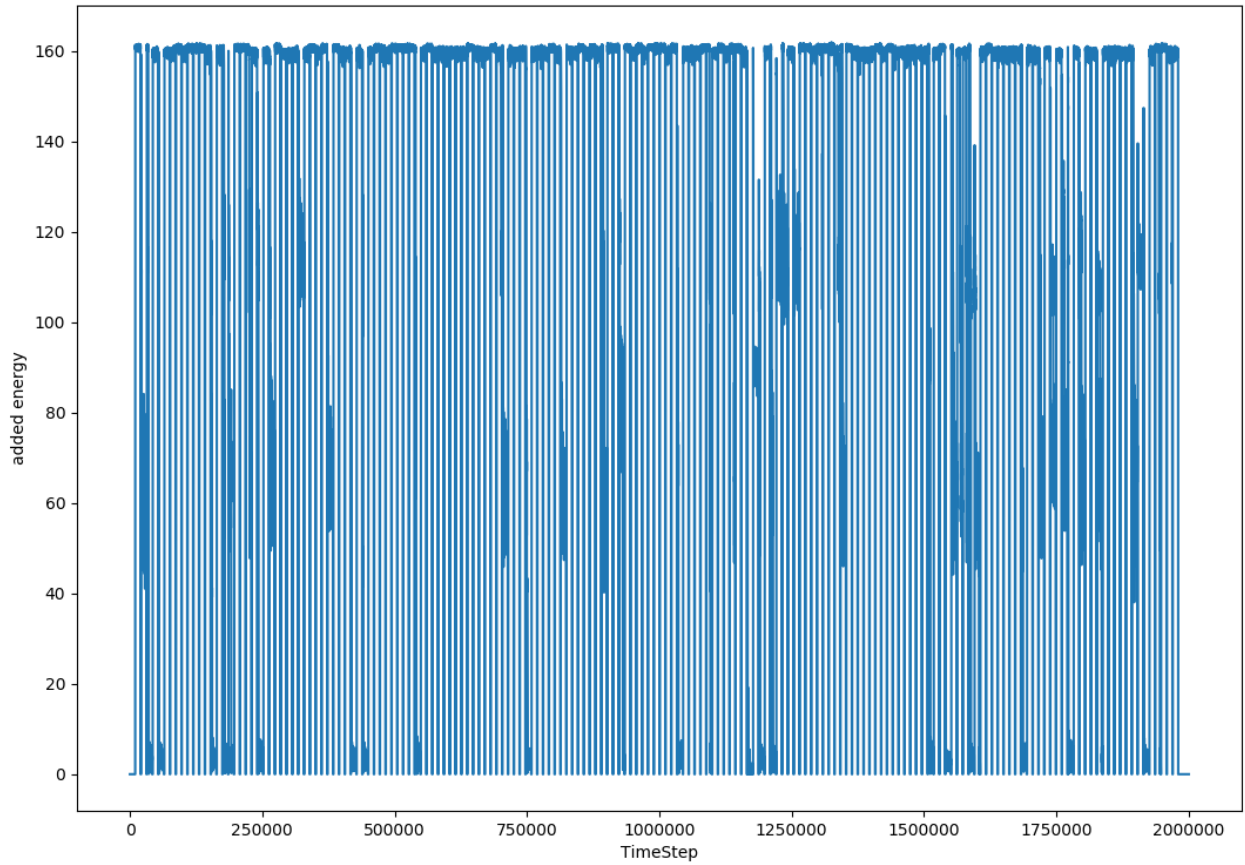
RESULT-cross linking percent: 0.40625 = **40.625%**



גרפים של לחץ, טמפרטורה, אנרגיה שהפוטנציאל מוסיף, אנרגיה פוטנציאלית, סך האנרגיה כתלות בזמן



Additional Energy As A Function Of Time



Potential Energy As A Function Of Time

