

# 2017 热导率模拟计算实验大纲

---

周阳 y\_zhou@fudan.edu.cn

## Lecture 1

---

- 课程简介
  - 课程目标
- 分子动力学原理
  - 动力学方程
  - 积分算法
  - 边界条件和初始条件
  - 经验势
  - 各种系综的实现
- 分子动力学计算物理量
  - 能量
  - 温度
  - 压强
  - 对关联函数和径向分布函数
  - Example
- 作业
  - 编写一个代码，用Verlet算法数值求解N个Ar理想气体原子的牛顿方程
  - 验证玻尔兹曼速率分布

## Lecture 2

---

- 环境搭建和工具
  - Linux基本指令
  - gcc和代码编译
  - Makefile的编写
  - python 生成脚本并调用
- LAMMPS
  - LAMMPS是什么
  - LAMPPS的安装和使用
- LAMMPS脚本实例
  - 模拟构型的搭建 - box, domain, lattice 命令
  - 分子性质的指定 - mass, potential 命令
  - 初始条件和边界条件 - velocity, boundary 命令
  - 让分子动起来和系综 - fix 命令族
  - 物理量的计算 - compute 命令族
  - 数据的输出 - dump 命令族
- 作业
  - 用lammeps重复上次课的作业
  - 用lammeps计算Ar理想气体的融化曲线，求出融化温度

## Lecture 3

- 
- 热传导是什么
    - Fourier's Law
  - 分子动力学计算热导率-原理
    - Direct Method
    - Muller-Plathe
    - Greek-Kubo
    - Compare
  - LAMMPS计算热导率
    - langevin热浴和NVT热浴
    - 自关联计算
    - 粒子交换的实现
  - Project
  - 作业
    - 仔细阅读本节课涉及的lammmps命令，弄清热导率计算的详细过程。
    - 开始课程大作业