

第一部分：用 Python 和 ase 搭出碳纳米管结构

一、Python 文件内容

```
import math
a_0=1.3
# least distance between C atoms
N_circle=10
# number of unit cells in a circle.
N_z=10
# number of unit cells along z axis.

largerbound=1.5
# largerbound>=1. boundary in x or y axes can be larger than 2*radius.

pi=math.pi
radius=2.0*pi*a_0/math.sqrt(3.0)/N_circle
print radius

from ase import Atoms
a1=Atoms('C',positions=[(-
radius,0,0)],cell=(2*radius*largerbound,2*radius*largerbound,3*a_0*N_z),pbc=(0,0,1))
a2=a1.copy()
a3=a1.copy()
a4=a1.copy()
a2.translate([0,0,2*a_0])
a3.translate([0,0,0.5*a_0])
a4.translate([0,0,1.5*a_0])
a3.rotate('z',pi/N_circle,rotate_cell=True)
a4.rotate('z',pi/N_circle,rotate_cell=True)
a1.extend(a2)
a1.extend(a3)
a1.extend(a4)
a=a1.copy()

all=a.copy()

counter=1
while counter<N_circle:
    add=a.copy()
    add.rotate('z',2.0*counter*pi/N_circle,rotate_cell=True)
    all.extend(add)
    counter=counter+1

a=all.copy()
```

```

counter=1
while counter<N_z:
    add=a.copy()
    add.translate([0,0,3*a_0*counter])
    all.extend(add)
    counter=counter+1

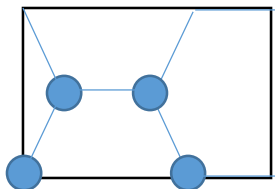
all.translate([radius*largerbound,radius*largerbound,0])

print all.positions
from ase.io.vasp import write_vasp
write_vasp("POSCAR",all ,sort=True,direct=True,vasp5=True)

```

二、python 文件内容简要说明

基本思路是，先考虑石墨烯二维结构，取矩形基元，每个基元含四个碳原子。示意图如下。



该图横轴对应z轴，纵轴对应y轴。然后将y轴卷成圆形，变成x轴和y轴，即得碳纳米管结构。

主要需设置三个变量。

第一个是相邻碳原子间距 a_0 ，以上设为1.3，单位可以任意取，一般须与lammmps输入文件采用的单位一致；注意这里间距是原始石墨烯结构的最近邻碳原子间距，但y轴卷曲后实际有些原子间距略小于该值，这里认为该差异的影响可以忽略不计（可以在之后的结构优化过程中排除影响）。

第二个是 N_{circle} ，以上设为10，即用 N_{circle} 个如上图所示的基元沿纵轴紧密排列后再卷曲成柱面。

第三个是 N_z ，以上设为10，即卷成柱面之后，再沿z轴取 N_z 个这样的重复结构单元。

另外有一个重要变量，即碳纳米管的半径radius。它与上述三个变量的关系是

$$a_0 = 2.0 \cdot \pi \cdot \text{radius} / \text{math.sqrt}(3.0) / N_{\text{circle}}.$$

$$\text{或 } \text{radius} = a_0 \cdot \text{math.sqrt}(3.0) \cdot N_{\text{circle}} / 2.0 / \pi.$$

利用此关系式，也可取radius为可直接设置的变量， a_0 为推出的量。即，原Python文件的前几行可以改为：

```

import math
radius=3.5836
N_circle=10
# number of unit cells in a circle.
N_z=10
# number of unit cells along z axis.

largerbound=1.001
# largerbound>=1. boundary in x or y axes can be larger than 2*radius.

pi=math.pi
a_0=2.0*pi*radius/math.sqrt(3.0)/N_circle
# least distance between C atoms
print a_0

```

或者，若严格要求最近邻碳原子间距相等（直线距离，而不是曲面距离），这时关系式应改为：

$$a_0 = 4.0 \cdot \text{radius} / \text{math.sqrt}(3.0) \cdot \text{math.sin}(\pi / 2.0 / N_{\text{circle}}).$$

或 $\text{radius} = a_0 \cdot \sqrt{3.0} / 4.0 / \sin(\pi / 2.0 / N_{\text{circle}})$ 。

前面一种方法得到的radius为3.58363782024，这种较严格的方法得到的是3.59841747351。
另外设了一个常数largerbound=1.5，含义是x和y方向“晶胞”边长放大largerbound倍，而碳纳米管结构本身不放大。从而可以使碳纳米管外部存在一定的真空区域。这里将其设为大于1，主要是因为当其恰为1时，在vesta中观察示意图时，因vesta默认x、y方向也具有周期性，会有多余的原子被显示出来。

三、所得 POSCAR 文件

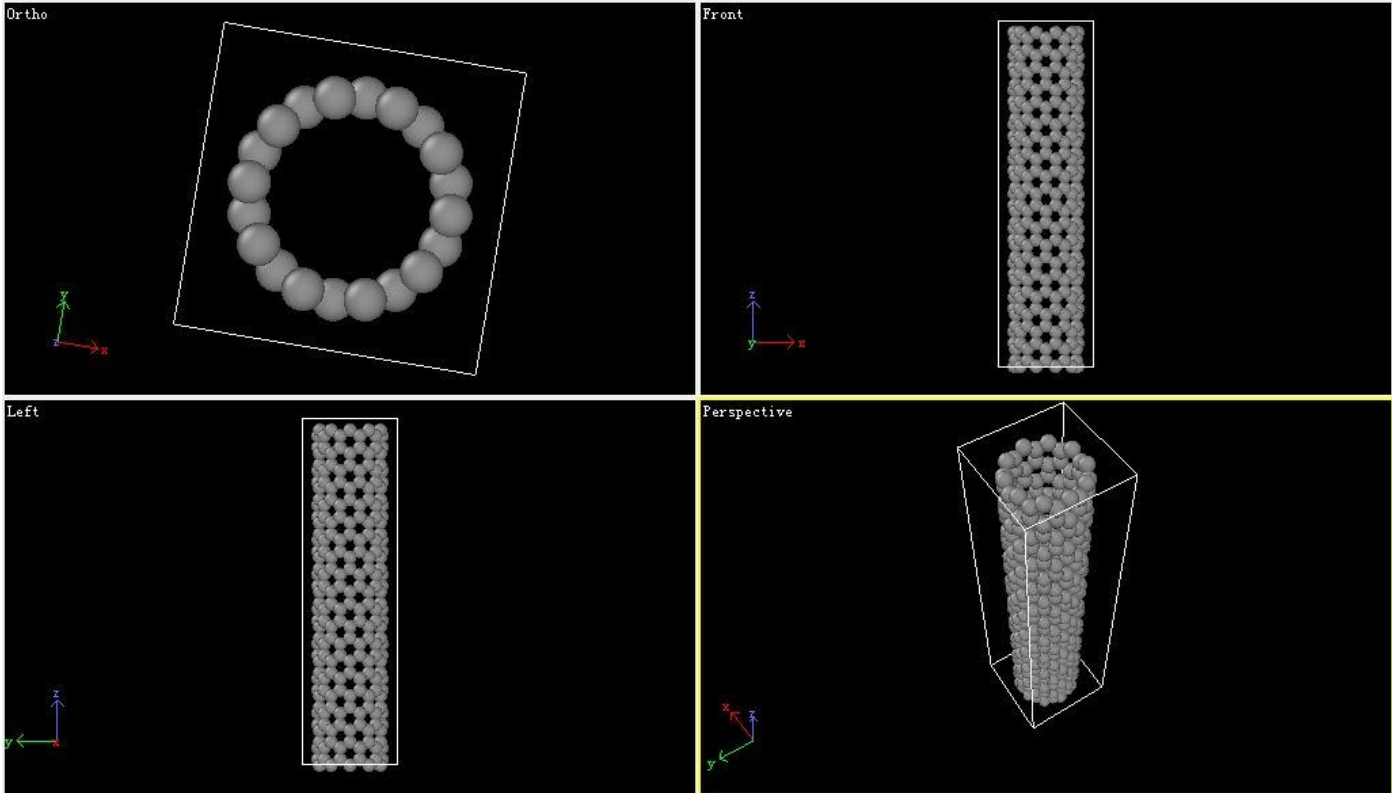
注：按照“一”中的Python文件运行，但其中求radius的方法换用“二”中红色字标出的较严格方法。

```
C
1.0000000000000000
 10.7952524205286409    0.0000000000000000    0.0000000000000000
  0.0000000000000000   10.7952524205286409    0.0000000000000000
  0.0000000000000000    0.0000000000000000   39.0000000000000000

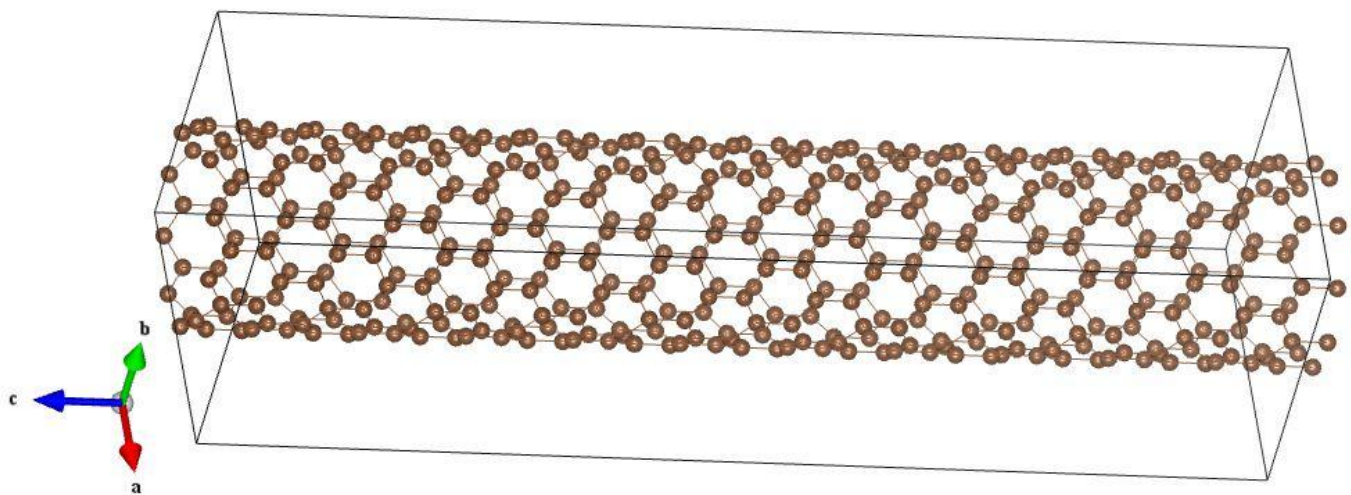
C
400
Direct
 0.1666666666666667   0.5000000000000000   0.0000000000000000
 0.3969943352083509   0.8170188387650512   0.6000000000000001
.....（中间略去多行）
 0.7696723314583157   0.3040715825691756   0.3000000000000000
 0.1829811612349488   0.6030056647916492   0.9500000000000001
```

四、示意图

在ovito中效果如下：



在vesta中效果如下：



第二部分：继续用 thermostat 方法求 Ar 的热导率

一、继续探索利用 thermostat 方法求出热导率的“正确”办法

按照上届同学姜修允的处理方法，可以看出他是直接由“正常的”计算结果乘上原子总数 8000，才得到了比较符合理论值的结果。但这是否因为巧合，还需进一步检验。

根据助教在微信群中阐述的惊人发现——将 thermo 的间隔步数减小为 1，可以得到正确的结果。这样，那个直接乘 8000 的方法可能真的只是巧合了。

为此，还是亲自试一试将 thermo 步数设为不同值，对结果的影响。

尝试时，仅在原始文件基础上进行相应改动。一些基本的设置采用其原始的默认值。

（一）每次修改的内容：

```
fix          ave all ave/time 10 100 1000 v_tdiff ave running
thermo       1000
```

原始设置：10 100 1000; 1000（thermo值）

设置情况	20000 步总的 f_hot	20000 步总的 f_cold	20000 步 v_tdiff 的平均值
10 100 1000;1000	-0.98330089	0.94990987	0.57623064
1 1 1;1000	-0.98330089	0.94990987	0.57589738
1 1 1;1	-0.98330089	0.94990987	0.57589738

结论：并没有像助教所说的那样，f_hot 和 f_cold 增大为原来的约 8000 倍。可能是修改的方法与助教的修改方法不一样。

可以发现将 fix ave 中的 10 100 1000 改为 1 1 1 后结果会有所不同，原因比较简单，因为前者是每十步取一次数据进行平均的。相比之下，前者运算时间应该会较短；且所取相邻数据的相关程度应该会较低；所以不妨保留原始设置。不过，又考虑到取为 1 1000 1000 倒也没什么坏处，所以后面计算时，fix ave 的平均方式设置改成了 1 1000 1000。

（二）在同学的提醒下，找到了助教亲自修改过的 thermostat 方法输入文件，可以看到助教添加了这样一行：

```
fix pp all ave/time 1 1 1 f_hot file hot.txt
```

于是尝试每次修改以下内容：

```
fix          ave all ave/time 10 100 1000 v_tdiff ave running
thermo       1000
fix pp1 all  ave/time 1 1 1 f_hot file hot.txt
fix pp2 all  ave/time 1 1 1 f_cold file cold.txt
```

原始设置：10 100 1000; 1000; - - -（这是fix pp1和pp2的设置，原来没有这两个fix）

设置情况	log 文件 f_hot	log 文件 f_cold	log 文件 v_diff 的平均值	txt 文件 f_hot	txt 文件 f_cold
1 1 1;1;- - -	-0.98330089	0.94990987	0.57589738	-	-
1 1 1;1;1 1 1	-0.98330089	0.94990987	0.57589738	-7866.41	7599.28
1 1 1;1;10 100 1000	-0.98330089	0.94990987	0.57589738	-7674.28	7478.85
1 1 1;1;10 10 100	-0.98330089	0.94990987	0.57589738	-7845.03	7587.76
10 100 1000;1000;10 10 100	-0.98330089	0.94990987	0.57623064	-7845.03	7587.76

结论：单独输出的txt文件所得的结果是数量级比较合理的。但可以发现其结果与求平均的设置有一定关系。

而log文件的f_cold和f_hot输出结果完全不受影响。分别将它们乘8000，所得结果分别为-7866.40712和7599.27896，发现该结果和1 1 1;1;1 1 1设置下的txt文件输出结果完全吻合。这说明在log文件中输出的f_hot和f_cold很可能的确是除以了原子数8000的结果。

为验证这一猜测，将1 1 1;1;1 1 1设置下的文件稍作改动，将xyz值全部改成6，看看结果是否恰好差864倍：

设置情况	log 文件 f_hot	log 文件 f_cold	log 文件 v_diff 的平均值	txt 文件 f_hot	txt 文件 f_cold
1 1 1;1;1 1 1	0.040277486	-0	1.7113472	34.7997	0

虽然由于某种原因，f_cold出现了bug，所有值都是0，这里不去深究。不过f_hot的结果0.040277486乘原子数864之后为34.7997479，与txt文件中的数据相符。这说明**直接采用log文件中的数据，乘上原子数作为总的能量交换值，应该是正确可靠的。**

（三）计算能流密度的方法

总的能量交换值已经可以直接由log输出结果乘上原子总数得到。时间容易由timestep乘上步数得到。

接下来问题在于面积的求法。当然由rho值易求得晶胞边长，从而得到横截面积，这些还不存在问题。但是**究竟应该除以一个横截面积还是除以两个横截面积呢？**

从我们上次的作业情况看，好像都是除以一个横截面积。这样刚好得到的结果kappa约为7，SI制下约为1.3，与理论结果比较吻合。

但是从构建的模型看，沿z轴是个周期性边界条件，热源区可以同时向两侧输出热流，而冷源区可以同时从两侧接收热流。**因为是两侧，似乎除以两个横截面积才是合理的。**

按此思路，在thermostat和mullerplathe方法中，由于都是通过两个侧面传热，所以都需多除以一个2。所以**本人的计算结果很可能会比理论结果小一半。**这个问题先保留，后面再考虑为什么会比理论结果小一半，以及哪种方法正确的问题。

不过考虑到greenkubo方法直接跑出的结果只有约2.85，而thermostat与mullerplathe方法直接跑出的结果约为7，除以2后为3.5，倒是与greenkubo方法的结果较为接近了。

（p.s.后面计算结果表明，多除以一次2应该是对的。）

（四）计算温度梯度的方法

温度梯度应该用总的温差除以距离，还是根据各层温度拟合出直线再求斜率呢？

首先考虑到，在体系达到稳态时，取足够长时间，通过各横截面的热流总量应该接近相等。特别是无源区。而在两个有源区内部，应该是平均温度为设定的温度，且热源区中心位置与边缘处温度都应接近设定温度。所以稳态下实际温差应该等于设定温差。

但是另一方面，对于某些参数条件，平衡很难达到，这时可能不得不采用尚未达到平衡时的数据进行计算。**未达平衡态时，温度分布的特点应该是，在冷热两源附近，温度梯度较大；而远离热源和冷源的区域，温度梯度较小。这时应该取哪一段来计算温度梯度呢？**首先需要考虑一下此时的热流分布情况。既然温度梯度是不均匀的，此时热流分布应该也是不均匀的。**在冷热两源附近，热流较大；而远离热源和冷源的区域，热流较小。**而log文件输出的热流量应该是约等于冷、热源区边界位置处的热流。应该是较大的值。且不难猜测，该值应该是比达到热平衡时的值偏大。所以说如果在未达平衡态时，采用温差除以距离的计算方法，**将会导致热流密度计算结果偏大，从而导致热导率计算结果偏大。**这可能也是thermostat和mullerplathe两种方法在初步计算时结果比greenkubo方法大的原因。

既然 log 文件输出的热流量约等于冷、热源区边界位置处的热流，所以似乎取冷、热源区边界位置处的温度梯度更为合理。为此，冷热源区至少需要被更细致地分层。然后在边界附近找到温度分布线性程度较好的区域，进行温度梯度拟合计算，这样应该会比较合理的。

但存在一个问题，就是在热源区边界，一侧是热源区温度，该侧几乎没有温度梯度，仅另一侧存在温度梯度。这就导致边界处温度梯度可能不连续。考虑到稳态下，或接近稳态下，至少在冷热两源区外面较近的范围内，热流应该是连续的，或者说差别应该不大。所以可以取两源区外侧，温度分布线性较好的部分进行拟合。

又考虑到两源温度不同，所以对应的热导率可能不同，所以应该分别计算其附近的梯度。

受此启发，我们还可以利用热流密度的微观定义，计算各层的热流密度，再计算各层位置处的温度梯度，应该也是可以得到各层处的热导率的。这也正是本人上次作业对 thermostat 文件修改的意图。但由于这个改动比较大，似乎已经偏离了原始的方法，所以不妨将这种利用微观定义求出各层位置的热导率的方法视为第四种方法。其实这种微观的方法还可以与 mullerplathe 方法结合，不妨将其称为第五种方法。既然把它们看作第四、第五种方法，暂时先不去讨论它们，现在先关注第一种方法。

(p.s.后来发现，两源温差不能设得太大，否则结果会不可靠。求温度梯度时，似乎应该是求所设温度（平均温度）处的温度梯度。)

(五) 达到平衡的判断方法

一个比较简单的判断方法就是各个统计量都达到稳定状态，即没有随时间的明显上升或下降趋势，而是在一个平均值上下随机波动。或者看 profile 文件，各层温度描点后应该是线性程度足够高的。或者 f_hot 和 f_cold 应该是趋于相等的。另一方面，根据个人猜测，冷热两源区的温差也应该是趋于设定值的。然而尝试运行原始文件时，得到的温差统计结果只有 0.576，尚未达到设定值 0.7，这应该也说明原始文件尚未达到平衡状态，按照前面的分析，计算热导率结果应该是偏大的。

可是毕竟不能让程序跑得时间太久，那么有什么办法让它更快地达到平衡吗？

1. timestep 值的合理选取。显然如果 timestep 过于小，体系变化很缓慢，达到平衡所需计算时间会很长。但如果 timestep 过大，将导致计算精度下降，结果可靠性下降，甚至可能出现某些原子距离过近，相互作用力过大，加速度过大，导致数据越界或 lost atoms 等错误。因此在这三种方法中，本人都选取了自认为比较合理的 timestep 值，而没有直接采用默认值 0.005。本人选取的 timestep 为：

timestep \${dt}

其中：

variable N_dt equal 50

variable t equal (\${tlo}+\${thi})/2.0 #平均温度

variable dt equal 1.0/sqrt(3*\$t)/\${N_dt}

含义是，相距为 1sigma 的两个原子，若一个静止，另一个以设定的平均温度下的平均速度按匀速直线运动撞向静止的原子，所需时间为 N_dt 个 timestep，即 50 个 timestep。

这样，在较低温度下，timestep 可以自动增大，从而以相对较短的运算时间达到平衡。否则，原子在低温下运动速度很慢，如果 timestep 不随之调整，显然达到平衡也会很慢。

另一方面，原子数密度很小时，达到平衡也会比较困难。这时似乎可以适当增大 timestep 值，但是实际计算时发现，不能盲目增大 timestep 值，否则很容易出现运算错误。所以这种情况下，如何使其更快地达到平衡的问题尚未解决。目前本人只能想到逐渐减小原子数密度，直到计算时间所能允许的程度，然后再适当外推的方法。

在原始文件的设定条件下，按本人的 timestep 选取方法，对应的 timestep 值为 9.938e-3，约为 0.01，即约为原始设定值的 2 倍。相差不是很多。总的来说是通过牺牲准确度来更快地达到体系平衡。毕竟原始文件总共跑了 30000 多步还没有真正达到平衡。

当然，如果想让 timestep 的设置与原始设定更接近，只需将 N_dt 由 50 改为 100 即可。

(p.s.后来鉴于运行时太容易报错，又将 timestep 恢复为原始值 0.005)

2. Tdamp 值的合理选取。

Tdamp 过大，往往直接导致达到平衡所需时间过长。但 Tdamp 过小，可能会使体系物理量波动较剧烈，从而也容易导致某些原子速度急剧增大或原子间距急剧减小等，导致数据越界或 lost atoms 等错误。

经本人的尝试（参见上次作业），Tdamp 的一些原始设定值可以适当减小，从而有利于系统更快地达到平衡，以减小程序运算的总步数，节省运算时间。

3. 如果实在很难达到平衡：

这时可以勉强拿最接近平衡的数据计算。注意温度梯度取冷热源区边界附近线性程度较好的区域进行计算即可。其实也可以特地取几段未达平衡时的数据，看看各自的计算结果，例如 10000 至 20000 步，20000 步至 30000 步，30000 步至 40000 步，分别计算其结果，看其变化规律，以判断计算结果是否可靠。

当然也可以对不同的参数条件，分别临时调节 timestep 和 Tdamp 值，因为原则上这些参数应该不会对最终结果带来明显的系统误差。

二、修改后的输入文件

见附录 1。

初始的默认参数设置：

```
variable      x equal 10
variable      y equal 10
variable      z equal 20
variable      dz equal 1 #高温区、低温区分别所占宽度

variable      a equal 1.882072058 #晶格常数（以 sigma 为单位）. 等于（4/pho）的立方根。
variable      rho equal 0.6 #约化原子数密度=4/a^3(1j 单位)
variable      p equal 1.0*${atmos_p} #压强。含 npt 过程时需设置。
variable      tlo equal 100*${SI_T} #低温。
variable      thi equal 200*${SI_T} #高温。

variable      run_npt equal 0
variable      run_nvt equal 1000
variable      run_langevin1 equal 0
variable      run_langevin2 equal 50000

variable      N_thermo equal 1000

#基本不需要改动的参数
variable      rc equal 2.5
variable      t equal (${tlo}+${thi})/2.0 #平均温度
variable      halfz equal $z/2

#变量：随机数 seed
variable      seed_velocity equal 1 #原 87287
variable      seed_lan_hot1 equal 1 #原 59804
variable      seed_lan_cold1 equal 1 #原 287859
variable      seed_lan_hot2 equal 1 #原 59804
variable      seed_lan_cold2 equal 1 #原 287859

#可能需要优化的变量
variable      N_dt equal 50
variable      dt equal 1.0/sqrt(3*${t})/$ {N_dt} #timestep 值。原默认值 0.005。数值关系  $t' = t * (\epsilon / m / \sigma^2)^{1/2} = t * (0.0103235761 * 1.6021765314e-19 / (39.948 / 1000 / 6.022141510e23) / (3.405e-12)^2)^{1/2} = 1466.408305t$ 。（t 单位为 s）。单位：1.0 对应 6.819383091e-4s。
#注意！！dt 不能太大。由  $1/2 * m * v^2 = 3/2 * k_B * T$  估计速度，取 T=100K，原子碰撞所需时间  $t = \sigma / v = 1.36e-14s$ 。
#所以 dt 起码应小于 1.36e-14s. 1j 单位下，最近邻原子距离除以平均速度所得时间： $(1z / $z / \sqrt{2}) / \sqrt{3 * $t}$ 。
variable      tdamp_nvt equal ${dt}*10 #原 0.5
variable      tdamp_langevin equal ${dt}*3 #原 1.0
variable      tdamp_npt_t equal ${dt}*1
variable      tdamp_npt_p equal ${dt}*10
variable      epsiN equal 1e-30 #加在分母中，避免除以 0 错误。

timestep      ${dt}
```

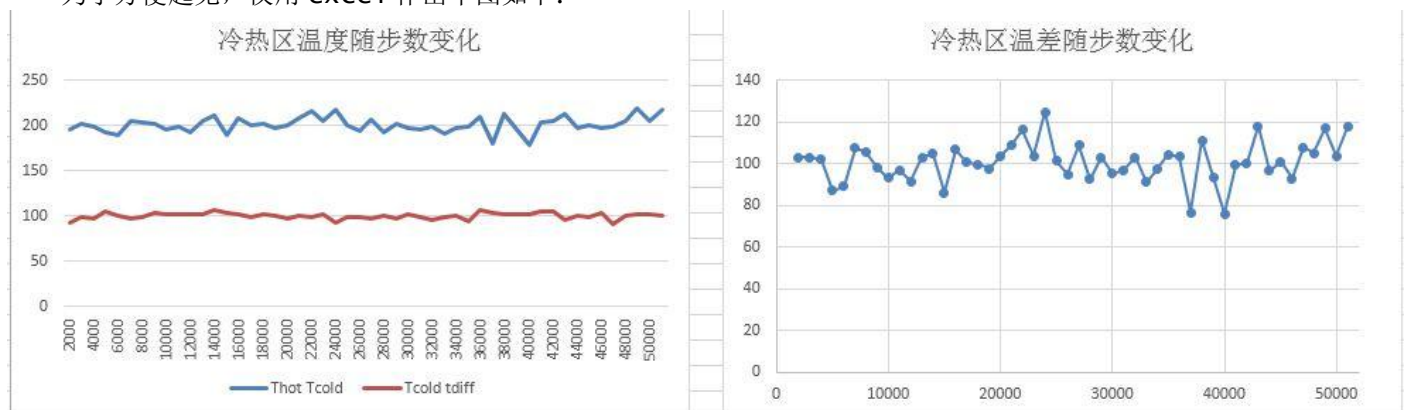
注意：以下各次运行参数，未列出的参数值认为与上述默认值相同。
后面 **timestep** 又统一改为 **0.01**。（p.s.后来又改为 0.005）

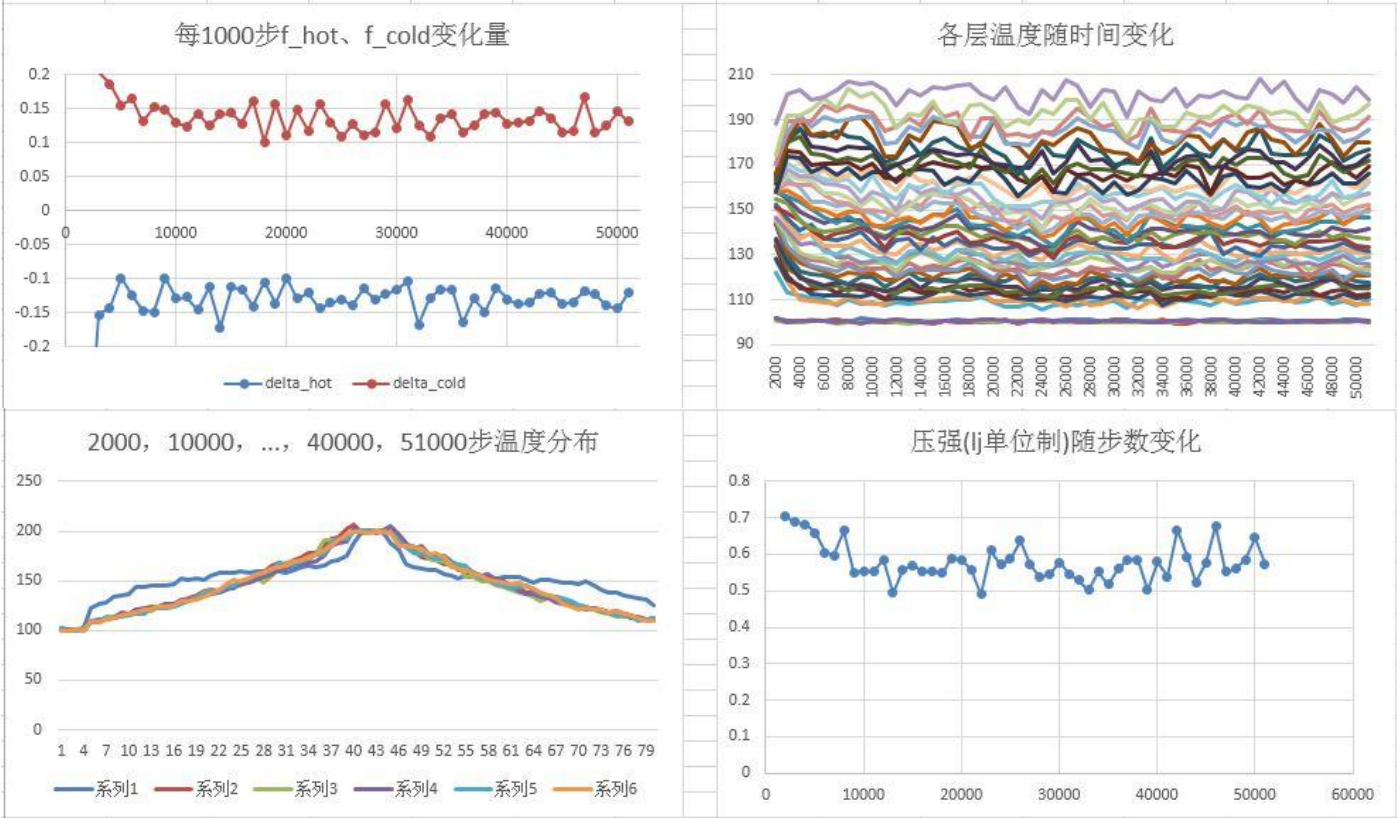
三、试运行。以及数据处理方法介绍

1.运行条件

约化分子数密度 0.6，平均温度 150K，热浴 100K、200K。（即上述默认设置）

为了方便起见，仅用 **excel** 作出草图如下：





可以看出在 10000 步之后基本达到稳态。所以可以利用 10000 至 51000 步的数据进行平均。
平衡时压强化为大气压单位，结果为 (234 ± 17) atm。
温度分布如下图：



从各层温度分布图看，高温处温度梯度较大，在假定已达到稳态，即各处热流相等的条件下，以初步判断温度较高的区域的热导率较小。

可以根据各个局部位置的温度以及温度梯度，分别得到相应各温度下的热导率。

考虑到编号为第 5 至 39 的区域内温度分布连续性较好，所以取这些区域的数据进行计算。计算各位置处温度梯度时，取其前后各两个点进行拟合计算。因此仅取编号为第 7 至 37 的区域，列出其结果。

(1) 能量交换值：平均每 1000 步， f_{hot} 、 f_{cold} 变化值分别为 (-0.1290 ± 0.0160) 和 (-0.1325 ± 0.0166) ，平均后得到 1000 步能量交换量 (-0.1308 ± 0.0115) 。除以 1000 步对应的时间，除以 2 倍截面积，乘上原子总数，得到能流密度 (0.1431 ± 0.0126) ，化为 SI 制为 $(5.0346 \pm 0.4438) \times 10^{10}$ （单位略，下同）。

(2) 温度梯度：拟合得到温度斜率后，注意到横轴是区域编号，每个区域长度为 0.25 个晶胞长，即 1z（z 方向总长度）除以 20 再除以 4（单位 sigma）。据此，温度斜率乘 20 乘 4 再除以 1z（1j 单位下数值）再除以 sigma（SI 制下数值）即得实际温度梯度。结果列表如下，均为 SI 单位制。

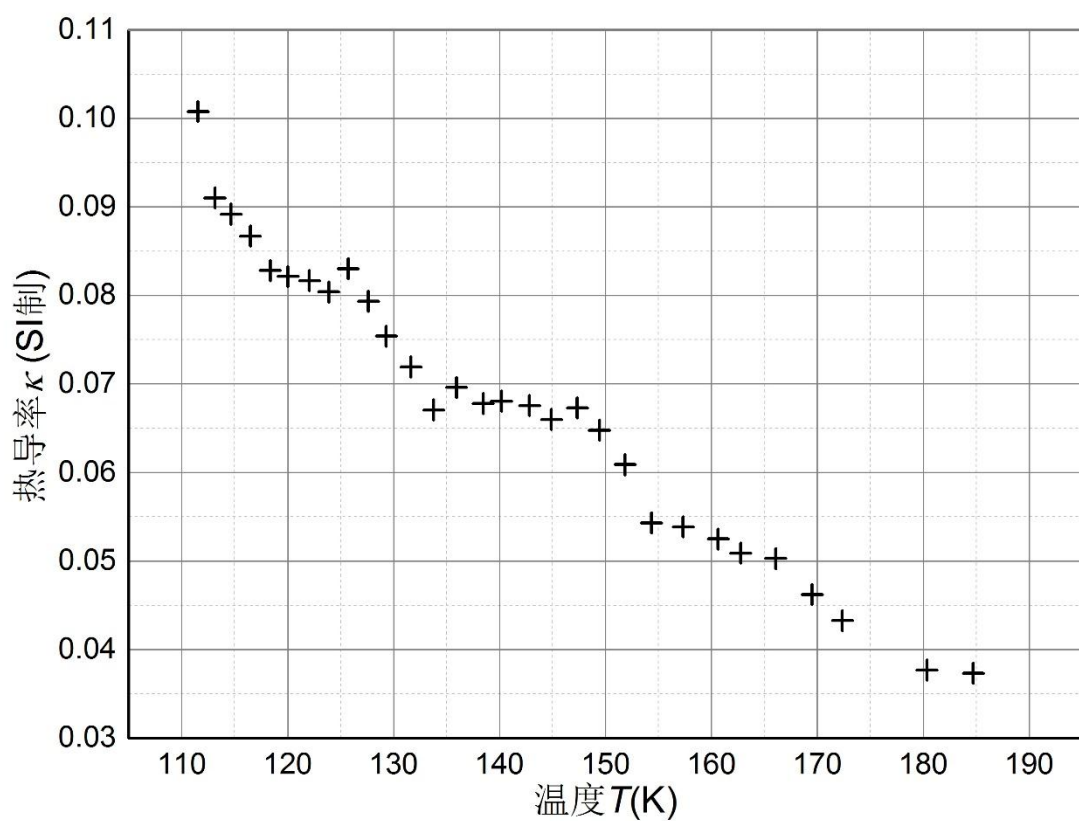
层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
7	111.5323	1.364387	9.3959E+09	3.0298E+09	0.100757	0.033682
8	113.1279	1.564581	1.0401E+10	3.1173E+09	0.091017	0.028433
9	114.6645	1.752825	1.0617E+10	3.2883E+09	0.089168	0.028714
10	116.486	1.666727	1.0919E+10	3.6332E+09	0.086706	0.029847

11	118.358	1.941759	1.1431E+10	3.7295E+09	0.08282	0.02799
12	120.0275	2.076529	1.1524E+10	3.7279E+09	0.082149	0.027543
13	122.0505	2.019974	1.1592E+10	4.0423E+09	0.081666	0.029373
14	123.8713	2.043804	1.1777E+10	4.2049E+09	0.080385	0.029562
15	125.7223	2.143081	1.1404E+10	3.9661E+09	0.083012	0.029782
16	127.6257	2.205773	1.1932E+10	4.0136E+09	0.079338	0.027587
17	129.3088	1.937246	1.2555E+10	4.3004E+09	0.075407	0.026671
18	131.6366	2.018226	1.3165E+10	4.5570E+09	0.071913	0.025687
19	133.7738	2.244923	1.4116E+10	4.1760E+09	0.067066	0.020702
20	135.9388	2.502432	1.3602E+10	4.5709E+09	0.0696	0.02418
21	138.4654	2.203074	1.3968E+10	5.5370E+09	0.067777	0.027524
22	140.1867	2.619254	1.3908E+10	5.6991E+09	0.068067	0.028529
23	142.8389	3.369413	1.4013E+10	5.3514E+09	0.06756	0.026479
24	144.8934	3.244718	1.4345E+10	6.0539E+09	0.065994	0.028451
25	147.3371	3.029191	1.4069E+10	6.5904E+09	0.067289	0.032074
26	149.429	3.394838	1.4617E+10	6.6048E+09	0.064769	0.029819
27	151.8412	3.317313	1.5549E+10	6.4810E+09	0.060883	0.025937
28	154.35	3.524176	1.7434E+10	6.6172E+09	0.054302	0.021159
29	157.3326	3.433862	1.7574E+10	6.7387E+09	0.053868	0.021194
30	160.6489	3.297547	1.8034E+10	6.8222E+09	0.052494	0.02039
31	162.77	3.508782	1.8598E+10	6.8433E+09	0.050903	0.01926
32	166.0779	3.379446	1.8824E+10	6.7152E+09	0.050293	0.018481
33	169.5161	3.561734	2.0479E+10	7.5407E+09	0.046228	0.017503
34	172.3546	3.437053	2.1878E+10	8.1849E+09	0.043271	0.016631
35	180.3436	4.87898	2.5122E+10	7.6379E+09	0.037684	0.011929
36	180.3436	4.87898	2.5122E+10	7.6379E+09	0.037684	0.011929
37	184.7238	4.02193	2.5369E+10	8.5741E+09	0.037318	0.013034

可以得到热导率随温度变化图。这个可以用 **origin** 认真做一下。

图象见下页。可以明显看出热导率随温度升高而减小。有点接近线性关系。

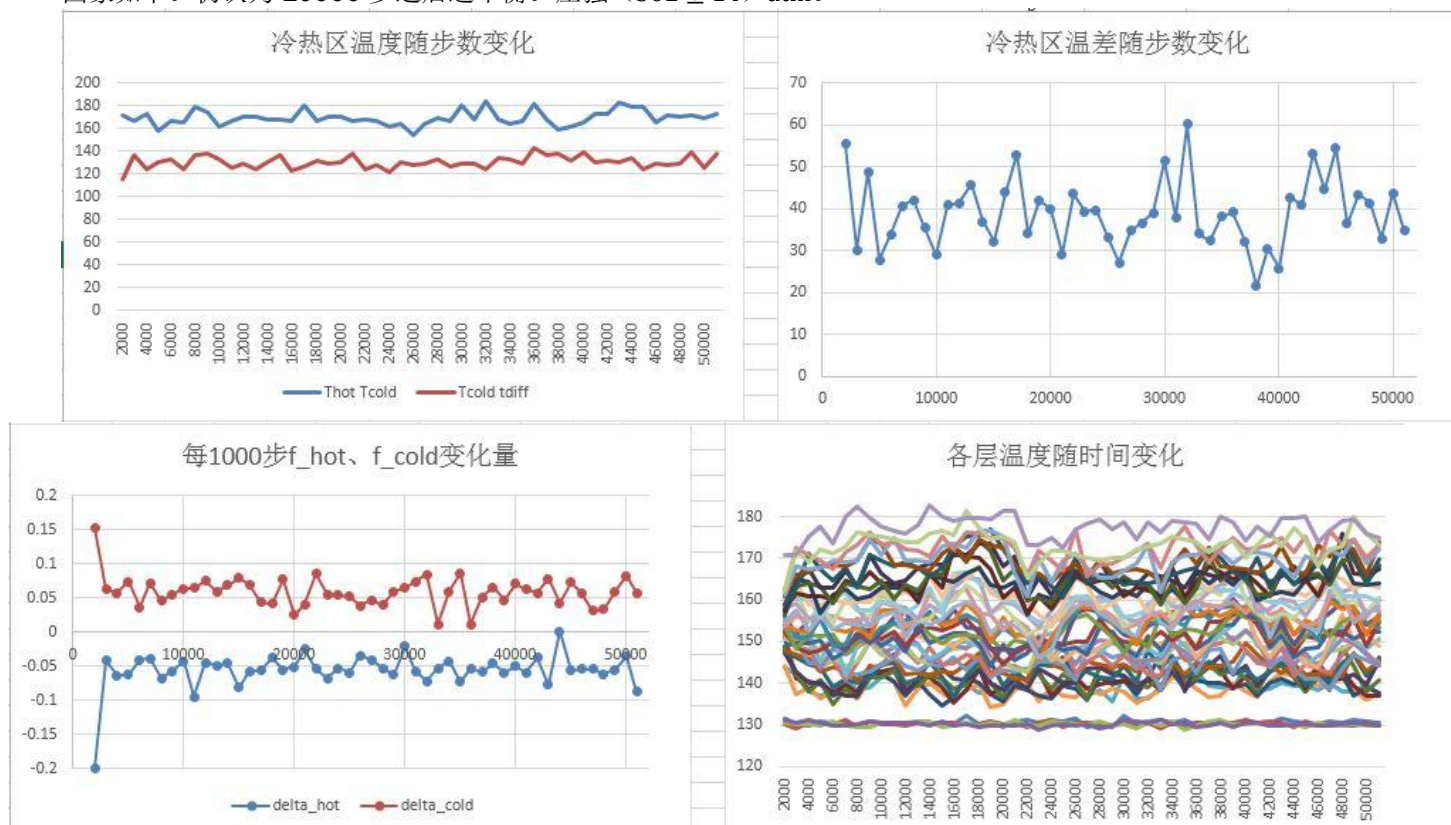
但是这里热导率随温度升高而减小的结论还不够可靠。因为并没有真正控制变量。在温度高的区域，原子数密度相对较小，也可能成为导致温度较高区域内热导率较小的原因。

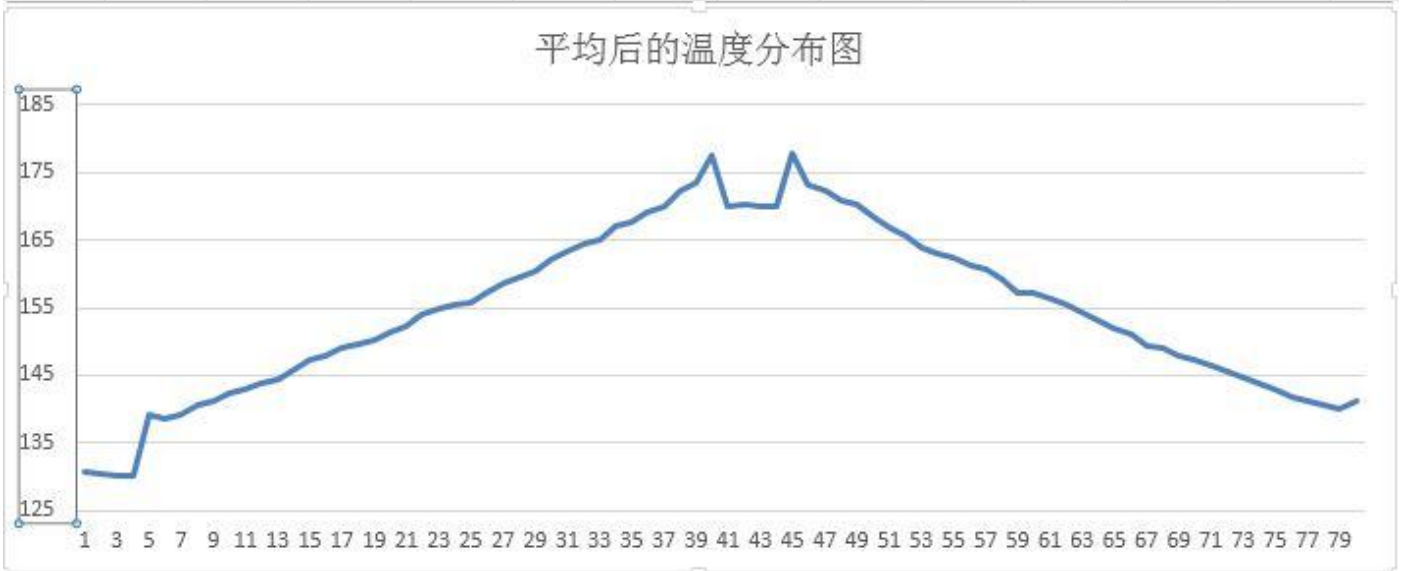
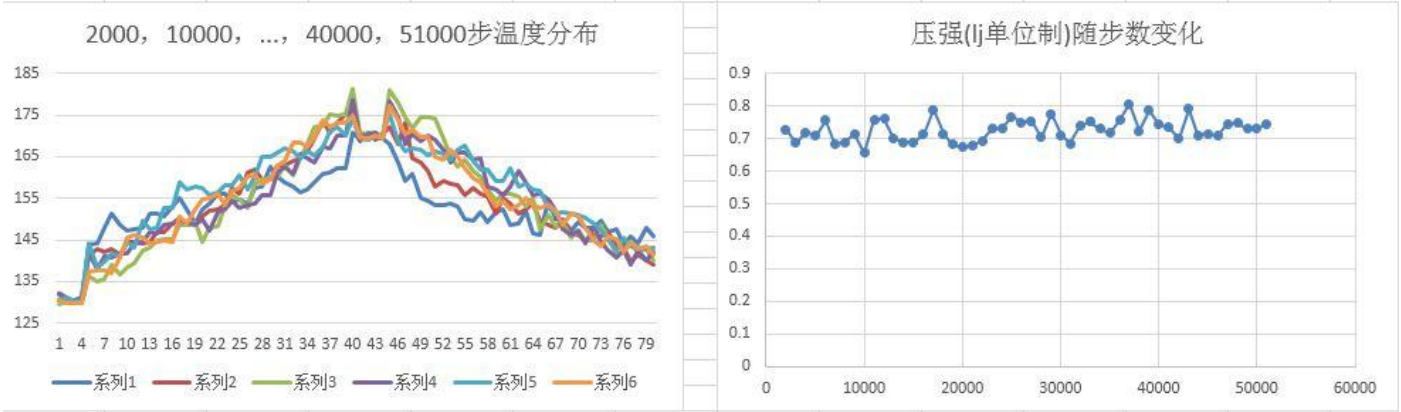


2. 为了验证上述结果的可靠程度，减小冷热两源的温度差，观察所得结果是否与上述结果相符。

(1) 130K, 170K

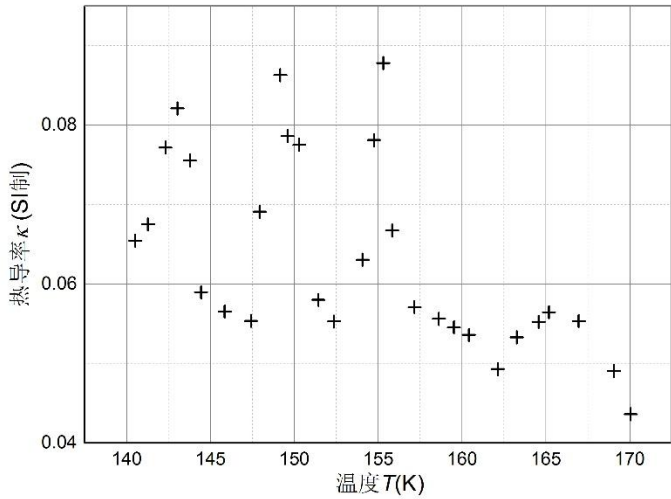
图象如下。仍认为 10000 步之后达平衡。压强 (302 ± 14) atm。





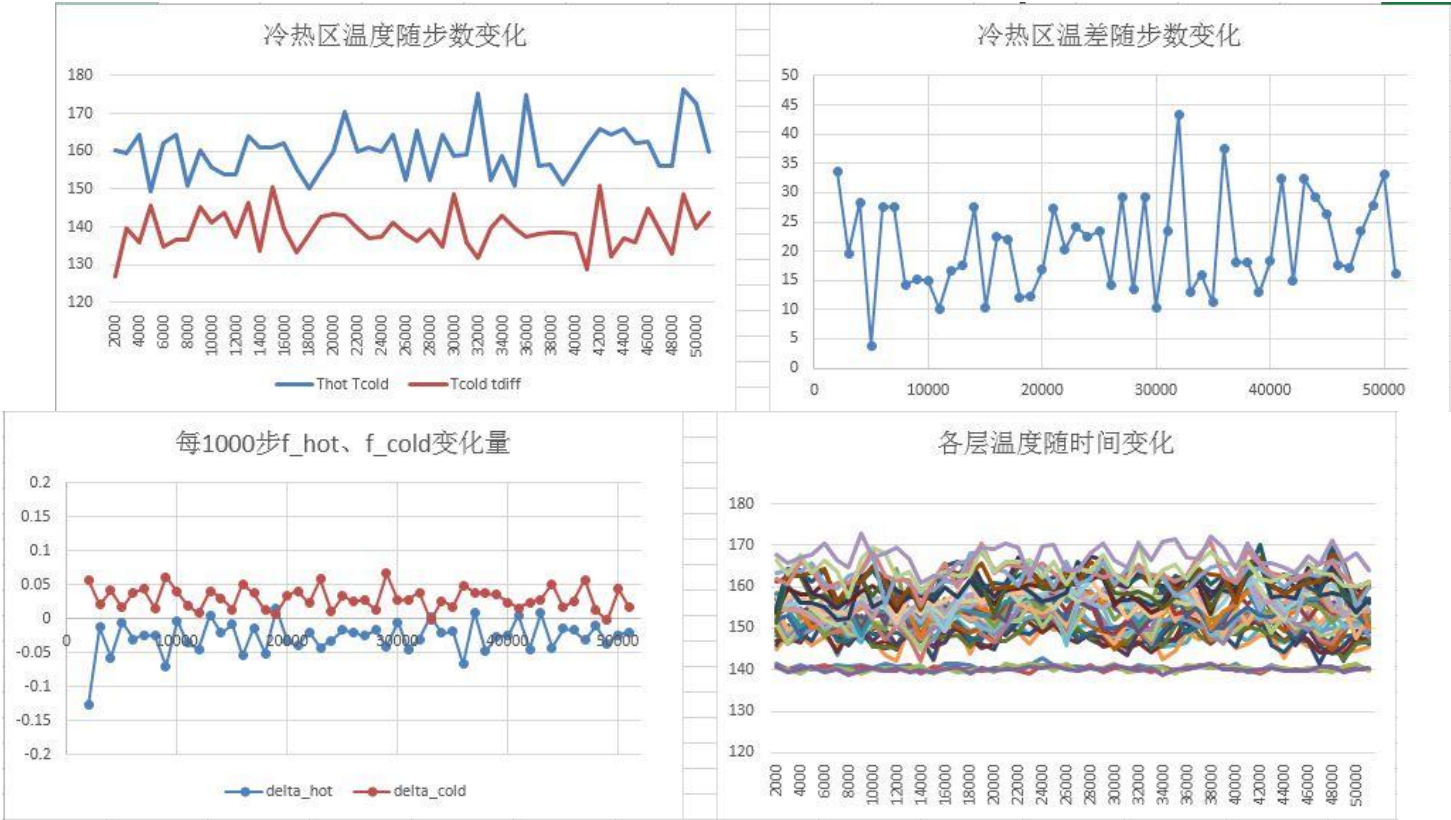
层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	140.5104	2.319056	6.0931E+09	4.6910E+09	0.065455	0.052581
9	141.2712	2.526793	5.9082E+09	4.4995E+09	0.067503	0.053688
10	142.3117	2.612824	5.1687E+09	4.4934E+09	0.077161	0.069374
11	143.0275	2.39751	4.8583E+09	4.8366E+09	0.082091	0.083864
12	143.7727	2.131951	5.2812E+09	4.9725E+09	0.075518	0.073183
13	144.4325	2.404884	6.7658E+09	4.6316E+09	0.058947	0.042556
14	145.8397	2.481251	7.0555E+09	4.5428E+09	0.056527	0.038635
15	147.4138	2.31121	7.2060E+09	4.9194E+09	0.055346	0.039858
16	147.9339	2.432309	5.7735E+09	5.2684E+09	0.069078	0.064995
17	149.1578	2.593817	4.6222E+09	5.0892E+09	0.086284	0.097039
18	149.5926	2.938829	5.0731E+09	5.2881E+09	0.078615	0.083907
19	150.2872	2.76403	5.1465E+09	5.2280E+09	0.077494	0.080703
20	151.4331	2.90451	6.8776E+09	5.9690E+09	0.057989	0.052055
21	152.3602	2.55789	7.2162E+09	5.6873E+09	0.055268	0.045365
22	154.0654	3.268099	6.3256E+09	5.7196E+09	0.06305	0.058814
23	154.7516	2.887342	5.1069E+09	6.2242E+09	0.078096	0.096853
24	155.3045	2.972539	4.5434E+09	6.2547E+09	0.087782	0.12251
25	155.8315	3.665751	5.9767E+09	6.0827E+09	0.06673	0.069617
26	157.165	2.996574	6.9873E+09	6.1514E+09	0.057079	0.051927
27	158.609	3.309349	7.1719E+09	6.4877E+09	0.055609	0.051895
28	159.513	3.057511	7.3107E+09	5.9405E+09	0.054553	0.04606
29	160.4026	2.99817	7.4431E+09	5.8357E+09	0.053583	0.043771
30	162.1245	2.946228	8.0914E+09	6.4479E+09	0.04929	0.040872

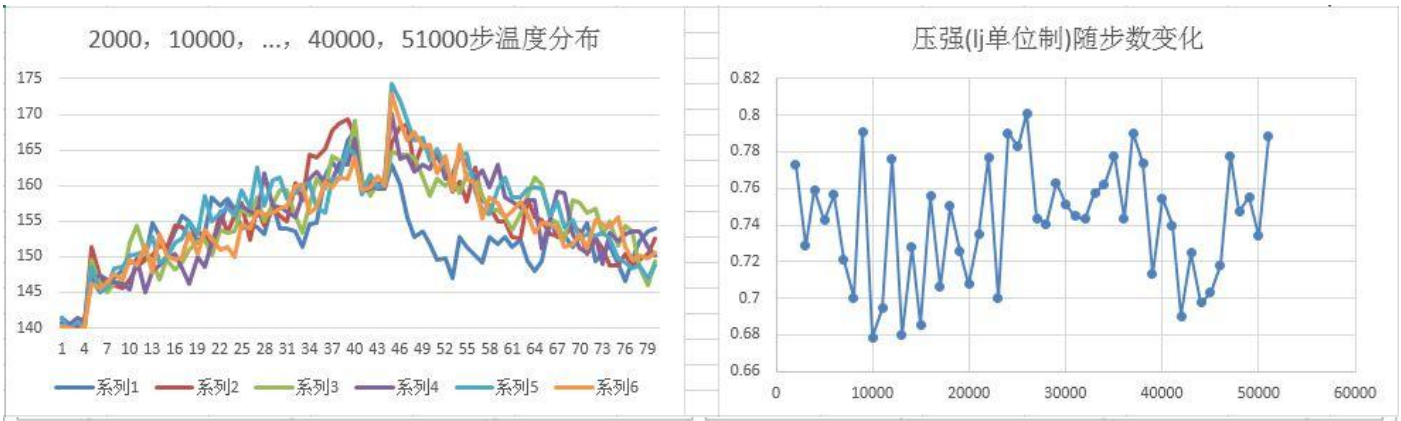
31	163.2656	2.528592	7.4846E+09	6.6413E+09	0.053286	0.048835
32	164.5632	3.67211	7.2222E+09	6.0956E+09	0.055222	0.048297
33	165.1789	3.711145	7.0681E+09	6.3999E+09	0.056426	0.052704
34	166.9532	3.181305	7.2101E+09	6.6964E+09	0.055315	0.052917
35	169.062	2.889631	8.1331E+09	6.3181E+09	0.049037	0.039719
36	169.062	2.889631	8.1331E+09	6.3181E+09	0.049037	0.039719
37	170.0502	3.53948	9.1455E+09	6.5674E+09	0.043609	0.032874



可以看出，温度梯度减小后，计算结果的标准差明显增大，数据点变得更加散乱无规。但是可以发现，与之前（100K，200K）的结果相比，相同温度对应的结果是基本相符的。这说明虽然（100K，200K）时温差较大，但结果还是比较可靠的。

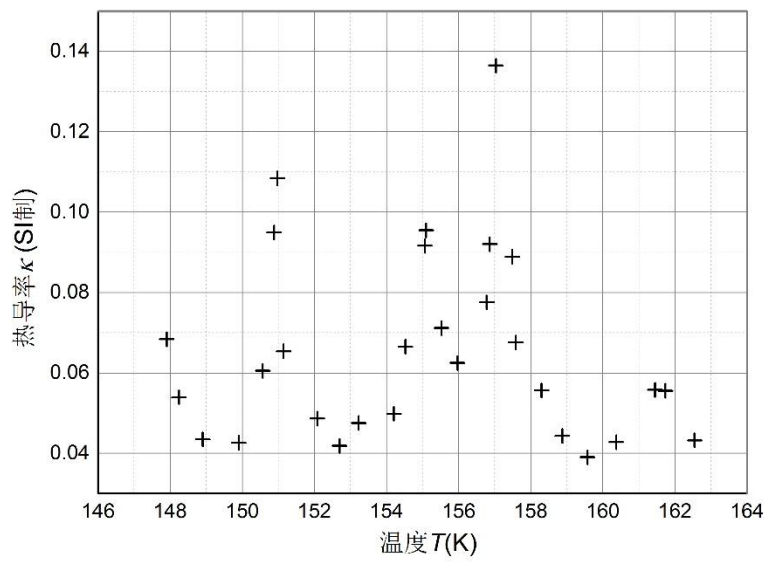
（2）再来一组温差更小的：（140K，160K）
 图象如下。仍认为 10000 步之后达平衡。压强（306 ± 13）atm。





层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	147.9043	2.46046	2.7718E+09	5.3002E+09	0.068389	0.134725
9	148.2433	2.438946	3.5154E+09	5.1028E+09	0.053923	0.082335
10	148.9054	2.859592	4.3615E+09	4.8487E+09	0.043462	0.052521
11	149.9038	2.337106	4.4492E+09	4.8133E+09	0.042606	0.050317
12	150.5679	2.485931	3.1335E+09	5.6183E+09	0.060495	0.112188
13	150.9761	2.308405	1.7486E+09	4.9531E+09	0.108407	0.311333
14	150.8794	3.062772	1.9967E+09	5.0747E+09	0.094939	0.245451
15	151.1488	2.52791	2.8997E+09	5.2410E+09	0.065372	0.122146
16	152.0809	2.723123	3.8989E+09	5.6939E+09	0.048619	0.074644
17	152.6982	2.8458	4.5320E+09	5.2348E+09	0.041827	0.052218
18	153.228	2.793005	3.9894E+09	5.3628E+09	0.047516	0.067723
19	154.2057	2.718418	3.8045E+09	5.9341E+09	0.049825	0.081219
20	154.5229	2.677166	2.8491E+09	5.6697E+09	0.066534	0.136102
21	155.0983	3.279556	1.9855E+09	5.3460E+09	0.095473	0.261011
22	155.0639	2.879258	2.0684E+09	5.6938E+09	0.091646	0.255984
23	155.5257	2.661846	2.6643E+09	6.1766E+09	0.071148	0.16835
24	155.9661	3.029119	3.0350E+09	5.5333E+09	0.062459	0.117656
25	156.7815	3.059269	2.4449E+09	5.2689E+09	0.077534	0.171079
26	156.8672	2.691781	2.0594E+09	5.7873E+09	0.092045	0.262306
27	157.0337	2.573587	1.3890E+09	5.8899E+09	0.13647	0.582271
28	157.4898	2.884605	2.1323E+09	5.7095E+09	0.088901	0.241746
29	157.5829	3.001697	2.8050E+09	5.4795E+09	0.067579	0.13584
30	158.3007	3.1248	3.4074E+09	5.6608E+09	0.055632	0.096105
31	158.8752	2.849954	4.2767E+09	5.9070E+09	0.044324	0.064722

32	159.5732	2.821178	4.8593E+09	5.9320E+09	0.03901	0.051081
33	160.3725	2.991493	4.4332E+09	5.9049E+09	0.04276	0.060449
34	161.4446	2.923651	3.3983E+09	5.8615E+09	0.055781	0.099776
35	161.7363	3.052693	3.4124E+09	5.8729E+09	0.05555	0.099159
36	161.7363	3.052693	3.4124E+09	5.8729E+09	0.05555	0.099159
37	162.5449	3.076409	4.3863E+09	5.9385E+09	0.043217	0.061987



(3) 结论：温差较大时对热导率计算结果不会带来明显的系统误差，且温差较大时计算结果的标准差相对较小，有利于得到较为精确的结果。所以接下来探究热导率随温度变化时，基本上取热源温度为冷源温度 2 倍。

四、热导率计算结果与温度的关系

因低温时易报错，所以将 timestep 统一改成 0.01，不再让它随温度下降而自动变大。

若约化分子数密度 rho 取默认值 0.6。温度降至 50K，100K 时，将出现原子集中到低温区的现象，导致高温区无原子，出现数据异常。因此统一取 rho 等于 1.414。

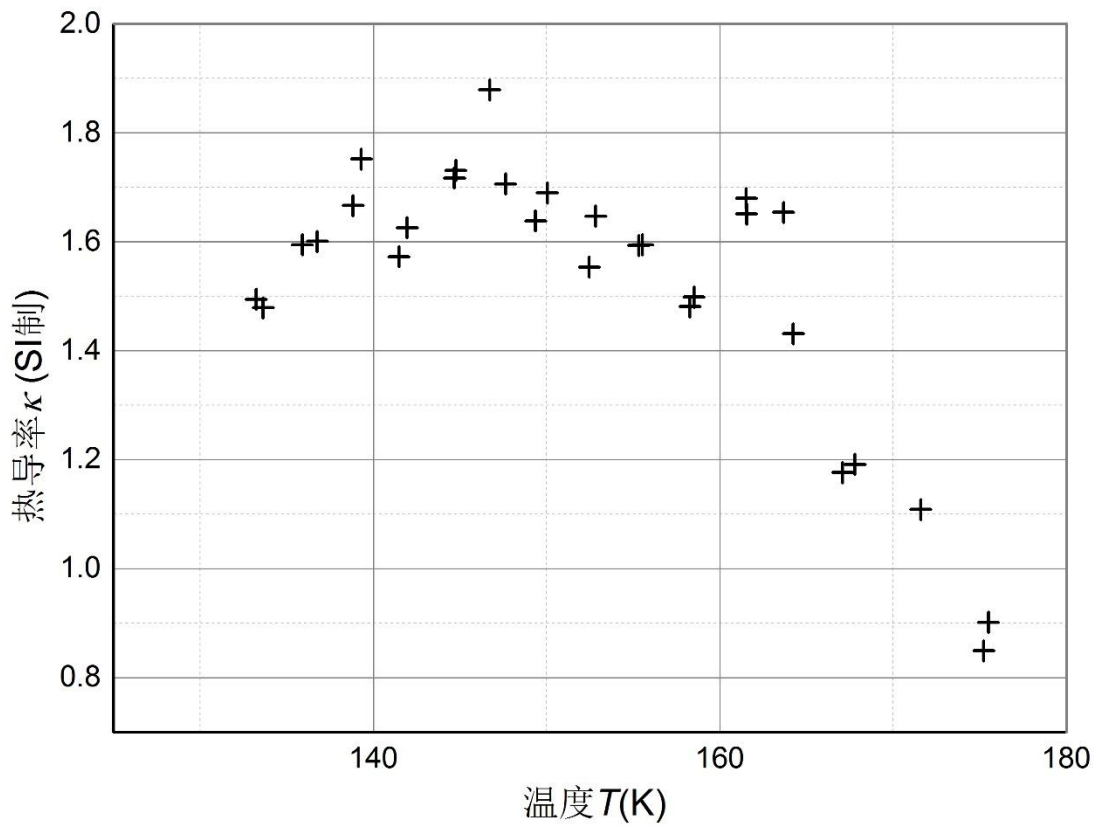
(一) 100K，200K

24000 步后稳定。压强 (29810 ± 65) atm。



层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	133.2275	1.984424	1.2688E+10	4.9578E+09	1.494401	0.585167
9	133.6353	1.344311	1.2823E+10	3.7377E+09	1.478611	0.432603
10	135.8978	1.610223	1.1893E+10	5.2159E+09	1.594292	0.700386
11	136.7552	1.408819	1.1845E+10	3.9523E+09	1.600695	0.535622
12	138.8264	2.22984	1.1379E+10	4.5305E+09	1.666258	0.664747
13	139.3013	1.400622	1.0825E+10	4.1931E+09	1.751587	0.679935

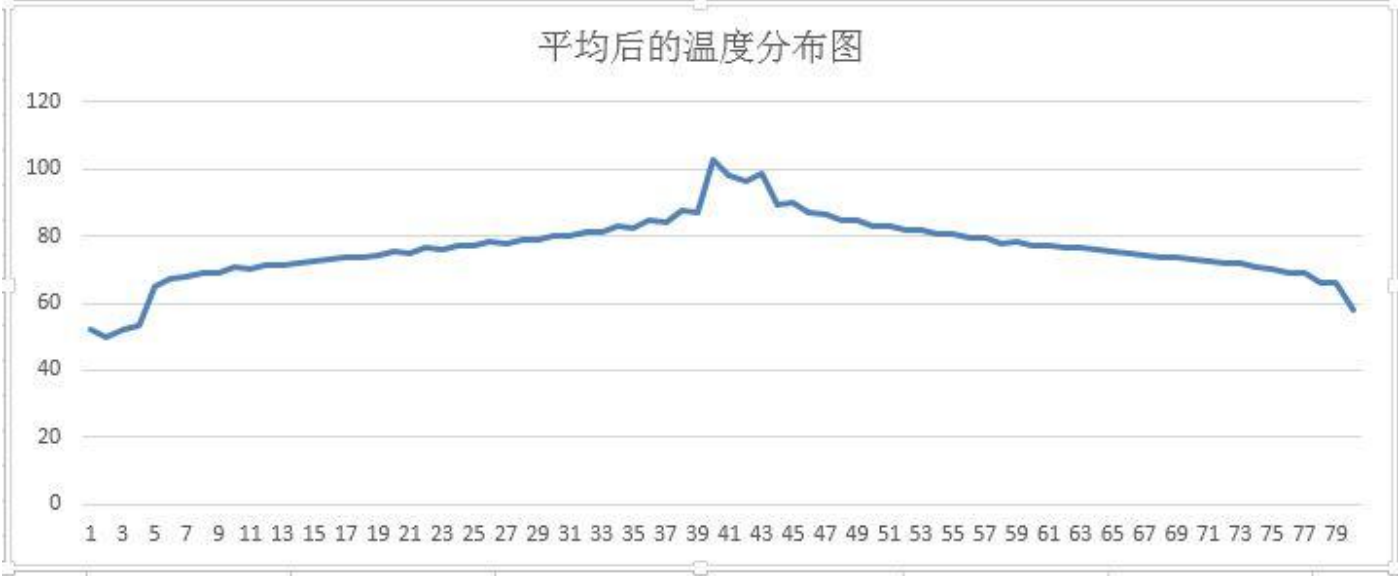
14	141.4745	1.964193	1.2057E+10	4.8639E+09	1.572514	0.635587
15	141.9472	1.475961	1.1662E+10	4.2139E+09	1.62577	0.58886
16	144.7614	1.601604	1.0955E+10	5.4153E+09	1.730807	0.856718
17	144.6781	1.69314	1.1043E+10	4.6071E+09	1.717012	0.717654
18	146.7033	2.346659	1.0091E+10	4.9291E+09	1.878951	0.919023
19	147.6235	1.86934	1.1114E+10	4.7957E+09	1.706002	0.737395
20	149.363	2.155957	1.1573E+10	5.8036E+09	1.638343	0.822635
21	150.0383	1.711133	1.1221E+10	5.4036E+09	1.689727	0.814826
22	152.4623	2.256586	1.2204E+10	5.5402E+09	1.553632	0.706383
23	152.8284	2.156568	1.1512E+10	4.8572E+09	1.647068	0.696208
24	155.3142	2.139843	1.1899E+10	6.1350E+09	1.593443	0.822541
25	155.5419	1.789712	1.1892E+10	5.7125E+09	1.594391	0.766952
26	158.2683	2.565639	1.2802E+10	6.0372E+09	1.481007	0.699396
27	158.5098	2.093669	1.2654E+10	5.2898E+09	1.498434	0.627565
28	161.5367	2.594485	1.1484E+10	6.4937E+09	1.650981	0.934464
29	161.5245	1.89944	1.1290E+10	5.8476E+09	1.67945	0.870923
30	163.6741	2.588341	1.1465E+10	6.2363E+09	1.653794	0.900553
31	164.2371	2.156219	1.3247E+10	5.3151E+09	1.431251	0.575372
32	167.0818	2.301473	1.6118E+10	6.1024E+09	1.176333	0.446352
33	167.7951	1.905097	1.5916E+10	5.8784E+09	1.191258	0.440992
34	171.5976	2.173608	1.7106E+10	5.9402E+09	1.108438	0.38594
35	175.496	2.289145	2.1031E+10	6.0664E+09	0.901541	0.261041
36	175.496	2.289145	2.1031E+10	6.0664E+09	0.901541	0.261041
37	175.2357	2.163667	2.2326E+10	6.0110E+09	0.849248	0.229652



发现 rho 从 0.6 增大到 1.414 以后，热导率增大了两个数量级。上图中热导率随温度的变化趋势出现了一个极大值，这可能是温度分布还不够稳定导致的。

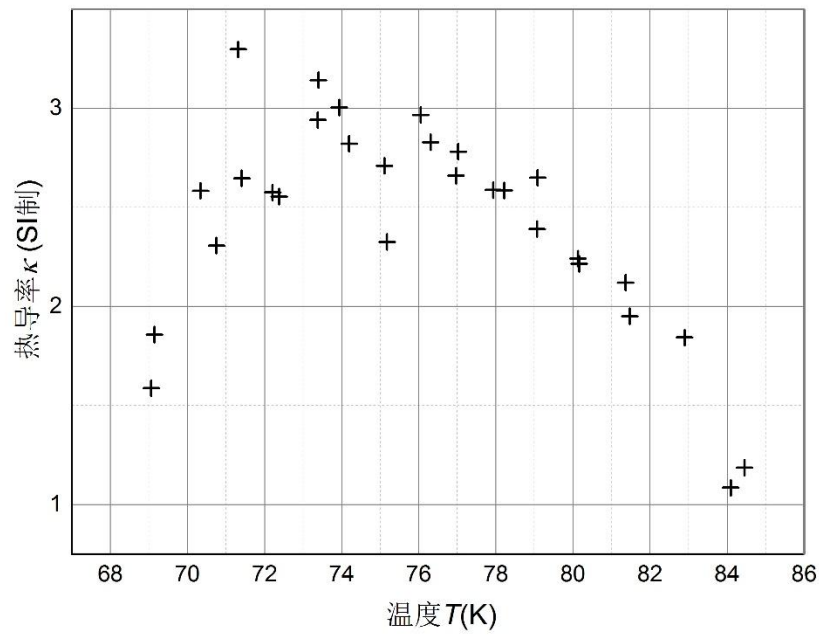
(二) 50K，100K

同样认为 24000 步后稳定。压强 (26860 ± 34) atm。



层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	69.0629	1.109493	6.8835E+09	3.0317E+09	1.587068	0.69991
9	69.14655	0.811913	5.8812E+09	2.3583E+09	1.857562	0.746042
10	70.7515	1.209233	4.7356E+09	2.6234E+09	2.306934	1.279066
11	70.34023	0.813546	4.2291E+09	2.1569E+09	2.583228	1.318789
12	71.31667	0.965708	3.3125E+09	3.0999E+09	3.297963	3.087198
13	71.40968	0.654091	4.1277E+09	2.3262E+09	2.646697	1.492784
14	72.21078	1.321891	4.2430E+09	3.2169E+09	2.574755	1.952992
15	72.37783	0.793032	4.2778E+09	2.3790E+09	2.553792	1.421383
16	73.38668	1.597838	3.7151E+09	3.5899E+09	2.940599	2.842259
17	73.39679	0.740115	3.4763E+09	2.6388E+09	3.142603	2.386568
18	73.93764	1.621158	3.6360E+09	3.4365E+09	3.004545	2.840502
19	74.19494	0.773933	3.8726E+09	2.5638E+09	2.821031	1.868744
20	75.17634	1.199795	4.6975E+09	3.3946E+09	2.32564	1.681442
21	75.10855	0.903947	4.0315E+09	2.2521E+09	2.709818	1.515037
22	76.3085	1.092412	3.8615E+09	2.9311E+09	2.829118	2.148396
23	76.05564	0.762037	3.6825E+09	2.4778E+09	2.966614	1.997208
24	77.02725	1.15068	3.9281E+09	3.0502E+09	2.781184	2.160525
25	76.9659	0.882126	4.1074E+09	2.6737E+09	2.659778	1.732429
26	78.21789	1.35575	4.2254E+09	2.9590E+09	2.585472	1.811539
27	77.93277	1.104115	4.2226E+09	2.7336E+09	2.587187	1.67587
28	79.08732	1.161603	4.1225E+09	3.3398E+09	2.650027	2.147748
29	79.073	1.064241	4.5706E+09	3.0076E+09	2.390181	1.573749
30	80.12931	1.271138	4.8750E+09	3.5264E+09	2.240967	1.621848
31	80.16309	1.147793	4.9329E+09	3.1600E+09	2.214638	1.419569
32	81.47679	1.59507	5.6018E+09	3.6340E+09	1.950216	1.265906
33	81.36867	1.202368	5.1537E+09	3.3050E+09	2.119767	1.36023
34	82.89853	1.574326	5.9276E+09	3.5289E+09	1.843017	1.098007
35	84.45201	1.122738	9.2166E+09	3.8388E+09	1.185323	0.49442
36	84.45201	1.122738	9.2166E+09	3.8388E+09	1.185323	0.49442

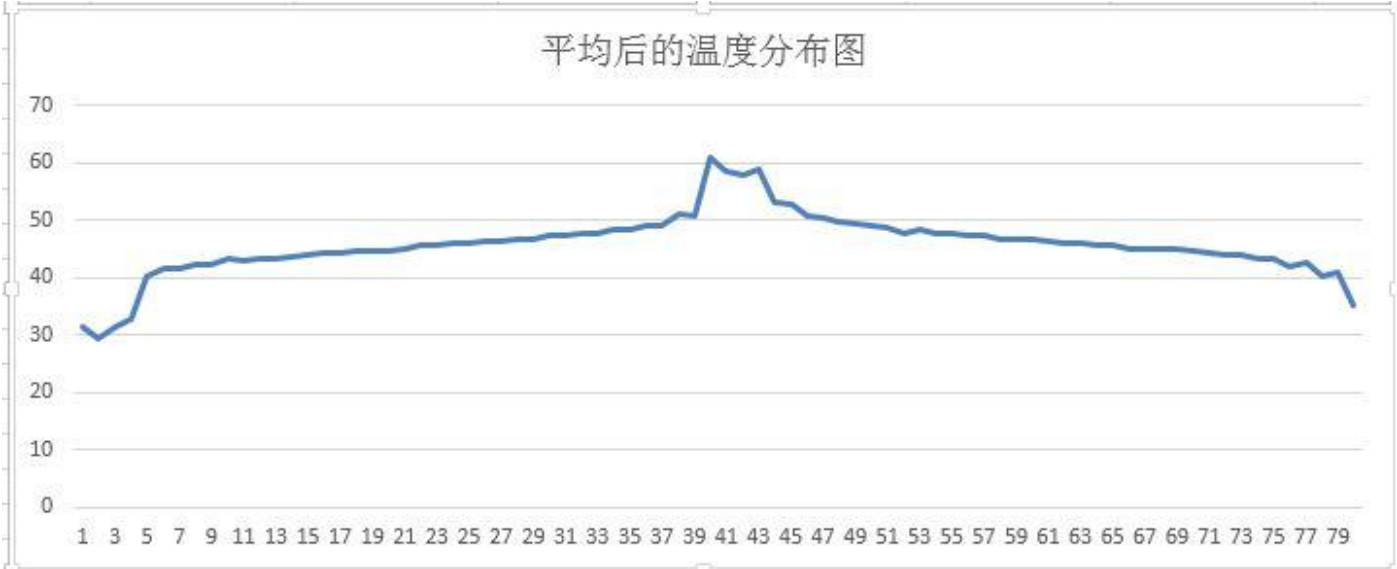
37	84.09675	1.157572	1.0077E+10	2.9442E+09	1.084106	0.317682
----	----------	----------	------------	------------	----------	----------



仍然出现了中间热导率高的现象。实际上是出现了中间温度梯度小、两边温度梯度高的现象。这是还没有真正达到平衡状态的表现。

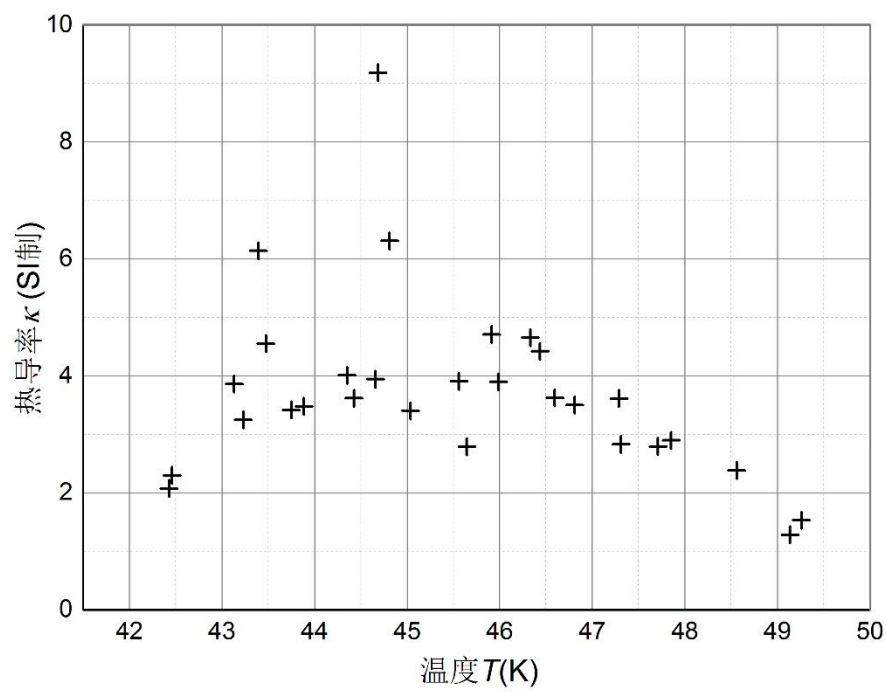
(三) 30K, 60K

压强 (25664 ± 65) atm。

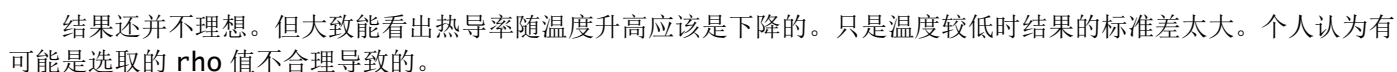


层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	42.42739	0.915231	3.3889E+09	2.3335E+09	2.072465	1.42825
9	42.45968	0.391705	3.0567E+09	1.5172E+09	2.297671	1.142332
10	43.23026	0.831257	2.1628E+09	2.2022E+09	3.24735	3.307731
11	43.13287	0.463075	1.8200E+09	1.4703E+09	3.859052	3.119577
12	43.39269	0.909721	1.1445E+09	2.1027E+09	6.136615	11.27554
13	43.474	0.500263	1.5436E+09	1.4932E+09	4.549935	4.403175
14	43.74863	0.891551	2.0575E+09	1.8983E+09	3.413514	3.150903
15	43.88409	0.433406	2.0209E+09	1.5376E+09	3.475323	2.64597
16	44.42617	0.607174	1.9433E+09	2.2098E+09	3.614203	4.111132
17	44.35172	0.561699	1.7529E+09	1.4557E+09	4.0067	3.329293
18	44.68457	0.921231	7.6480E+08	2.2019E+09	9.183186	26.43993

19	44.81005	0.525034	1.1139E+09	1.7508E+09	6.305157	9.912146
20	44.65739	1.113703	1.7820E+09	2.5477E+09	3.941198	5.635685
21	45.03583	0.522509	2.0646E+09	1.9667E+09	3.401779	3.241935
22	45.64438	1.1688	2.5196E+09	2.3944E+09	2.787476	2.650179
23	45.55936	0.688697	1.7985E+09	1.7688E+09	3.905012	3.841962
24	45.91231	0.806417	1.4926E+09	2.7416E+09	4.70542	8.643837
25	45.98451	0.597088	1.8034E+09	1.8613E+09	3.894567	4.021187
26	46.33028	1.072251	1.5096E+09	2.5553E+09	4.652468	7.876527
27	46.43591	0.575347	1.5904E+09	1.9262E+09	4.415949	5.349603
28	46.59532	1.24253	1.9388E+09	2.6345E+09	3.622551	4.92353
29	46.80937	0.560776	2.0073E+09	1.9766E+09	3.498824	3.446602
30	47.31061	1.097181	2.4825E+09	2.8138E+09	2.829115	3.207673
31	47.28659	0.630621	1.9452E+09	1.9129E+09	3.610674	3.552329
32	47.85107	1.07099	2.4262E+09	2.6083E+09	2.894786	3.113173
33	47.71004	0.650981	2.5161E+09	1.9356E+09	2.791337	2.148813
34	48.55935	1.027638	2.9507E+09	2.6832E+09	2.380205	2.165432
35	49.25877	1.119577	4.5851E+09	2.4888E+09	1.531781	0.832584
36	49.25877	1.119577	4.5851E+09	2.4888E+09	1.531781	0.832584
37	49.1355	0.658955	5.4869E+09	1.9265E+09	1.280017	0.450884

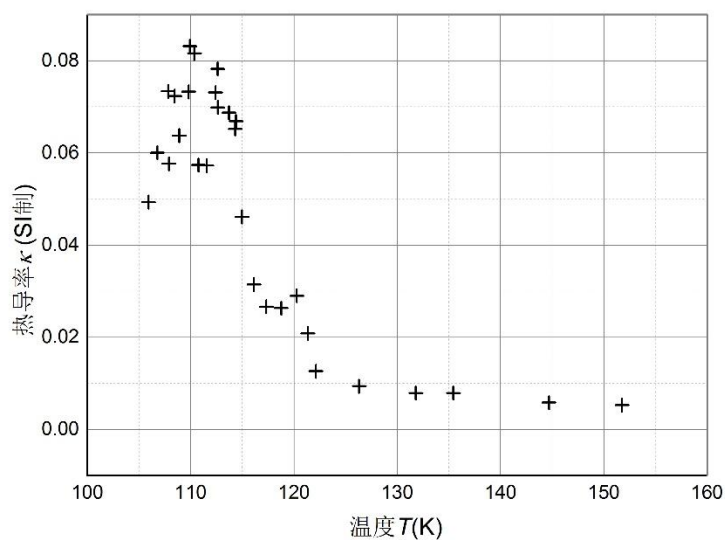


（四）其他：（15K，30K）（8K，16K）
连同前面的结果，将热导率随温度变化关系作图如下：（下页）





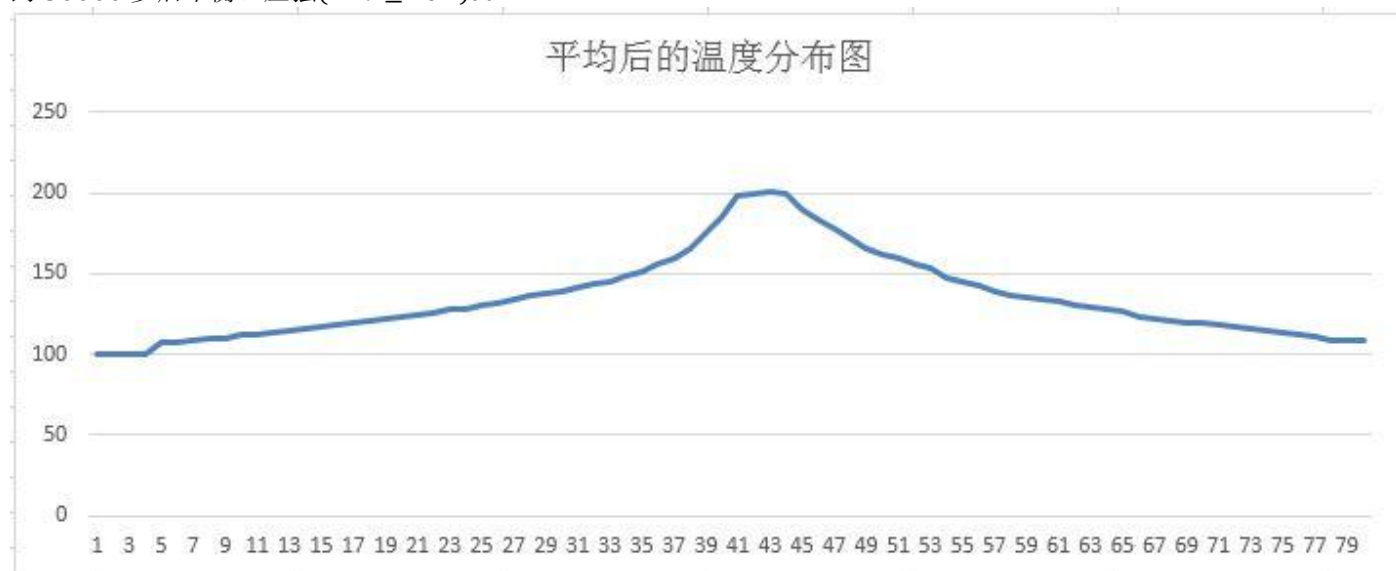
层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	105.9255	1.065407	3.9087E+09	1.6714E+09	0.049297	0.023969
9	106.7802	0.902892	3.2088E+09	2.4793E+09	0.06005	0.048433
10	107.907	1.0979	3.3431E+09	2.3302E+09	0.057638	0.042331
11	107.8287	1.56378	2.6257E+09	2.1278E+09	0.073386	0.061847
12	108.4668	1.617184	2.6635E+09	2.1066E+09	0.072343	0.059616
13	108.908	1.427059	3.0230E+09	2.5016E+09	0.063741	0.054772
14	109.8098	1.185607	2.6304E+09	2.3726E+09	0.073254	0.068214
15	109.9293	1.34596	2.3175E+09	2.2726E+09	0.083144	0.083771
16	110.3682	1.075238	2.3624E+09	2.0236E+09	0.081564	0.072371
17	110.7539	1.290659	3.3591E+09	2.3104E+09	0.057363	0.041627
18	111.5638	1.080858	3.3650E+09	2.1074E+09	0.057263	0.038233
19	112.4117	1.447638	2.6365E+09	2.1896E+09	0.073085	0.063008
20	112.6249	1.279763	2.4628E+09	2.0230E+09	0.078239	0.066768
21	112.641	1.28995	2.7580E+09	2.6947E+09	0.069866	0.070152
22	113.7076	1.154527	2.8043E+09	2.6020E+09	0.068713	0.065711
23	114.3995	1.807632	2.8819E+09	2.5059E+09	0.066862	0.060163
24	114.3171	1.679968	2.9556E+09	2.2637E+09	0.065196	0.052164
25	114.9789	1.605493	4.1802E+09	2.9077E+09	0.046096	0.033791
26	116.128	1.230693	6.1347E+09	3.4940E+09	0.03141	0.01931
27	117.3272	1.66048	7.2364E+09	4.1935E+09	0.026628	0.016616
28	118.7684	2.47165	7.3210E+09	6.0715E+09	0.02632	0.022662
29	120.2943	3.209825	6.6526E+09	7.3194E+09	0.028965	0.032565
30	121.3577	5.120241	9.2462E+09	8.8948E+09	0.02084	0.02062
31	122.1329	5.848809	1.5271E+10	9.8081E+09	0.012618	0.008614
32	126.3278	7.020596	2.0633E+10	1.0013E+10	0.009339	0.005021
33	131.8125	7.191002	2.4488E+10	1.0665E+10	0.007869	0.003881
34	135.4382	6.050619	2.4510E+10	1.2061E+10	0.007862	0.004275
35	144.6925	7.079549	3.3163E+10	1.3213E+10	0.00581	0.002677
36	144.6925	7.079549	3.3163E+10	1.3213E+10	0.00581	0.002677
37	151.7736	8.542258	3.6680E+10	1.2146E+10	0.005253	0.002122



热导率在 115K 附近有明显的下降，说明该体系可能存在两相共存的情况。该温度附近有个相变点。

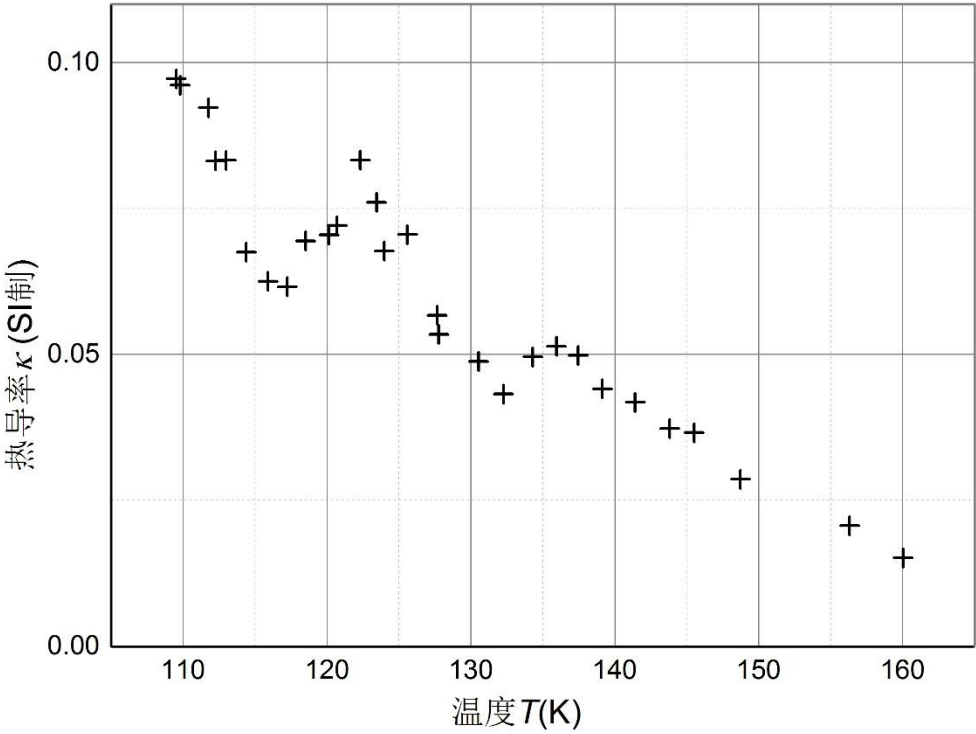
2. rho=0.5

约 30000 步后平衡。压强(72.9 ± 10.1)atm.

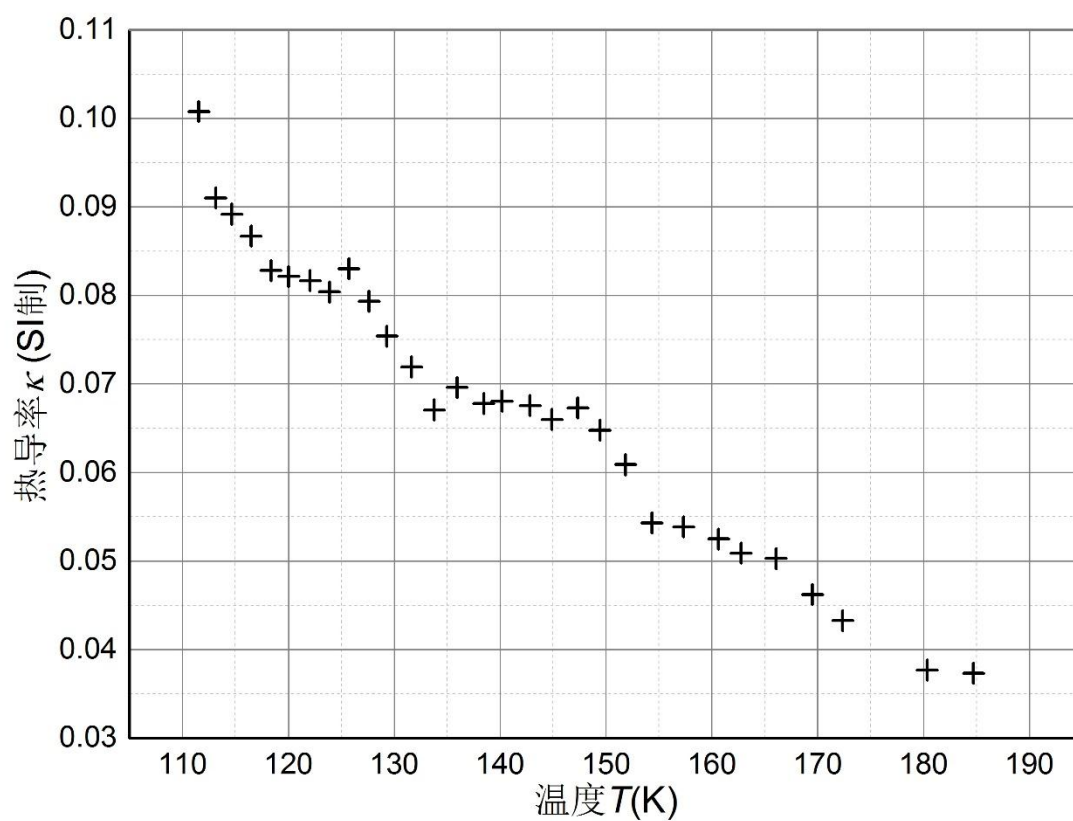


层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	109.523	1.103767	5.2485E+09	3.0762E+09	0.097204	0.058029
9	109.7903	0.838977	5.3096E+09	2.6949E+09	0.096086	0.049971
10	111.7444	1.837701	5.5293E+09	2.6281E+09	0.092268	0.045087
11	112.2646	1.469176	6.1356E+09	2.4628E+09	0.08315	0.034683
12	112.9927	1.752467	6.1281E+09	2.9896E+09	0.083252	0.041697
13	114.3891	1.441981	7.5537E+09	2.4863E+09	0.067539	0.023513
14	115.8987	1.4282	8.1599E+09	2.9691E+09	0.062522	0.023829
15	117.2417	1.021374	8.2824E+09	2.6390E+09	0.061598	0.020833
16	118.5125	1.592567	7.3482E+09	2.6095E+09	0.069429	0.025883
17	120.1325	1.350235	7.2397E+09	2.4006E+09	0.070469	0.024696
18	120.7084	1.475786	7.0785E+09	2.6723E+09	0.072074	0.028411
19	122.3065	1.397933	6.1252E+09	2.6189E+09	0.083292	0.036844
20	123.4511	1.301595	6.7081E+09	2.8385E+09	0.076054	0.033318
21	123.9752	1.476072	7.5338E+09	3.7837E+09	0.067718	0.034867
22	125.5843	1.620841	7.2348E+09	3.2244E+09	0.070517	0.03243

23	127.6531	2.70917	8.9972E+09	3.3419E+09	0.056704	0.022022
24	127.7707	1.860079	9.5456E+09	3.6232E+09	0.053446	0.021173
25	130.5409	2.095768	1.0452E+10	4.4986E+09	0.048813	0.021727
26	132.2661	1.988133	1.1809E+10	3.8744E+09	0.043202	0.014997
27	134.3024	2.339122	1.0289E+10	3.8523E+09	0.049583	0.019397
28	135.9425	2.225202	9.9249E+09	4.5020E+09	0.051403	0.024034
29	137.4615	2.033492	1.0237E+10	4.9947E+09	0.049838	0.024966
30	139.1351	2.886549	1.1567E+10	5.6193E+09	0.044105	0.022002
31	141.4199	3.047136	1.2211E+10	6.1783E+09	0.041781	0.021665
32	143.8099	3.817628	1.3676E+10	7.8154E+09	0.037305	0.021735
33	145.5184	4.218797	1.3938E+10	8.4175E+09	0.036603	0.022492
34	148.7273	5.399754	1.7818E+10	9.1648E+09	0.028632	0.015081
35	156.3238	5.835996	2.4682E+10	1.1398E+10	0.02067	0.009829
36	156.3238	5.835996	2.4682E+10	1.1398E+10	0.02067	0.009829
37	160.0345	6.702225	3.3662E+10	1.1620E+10	0.015156	0.005507

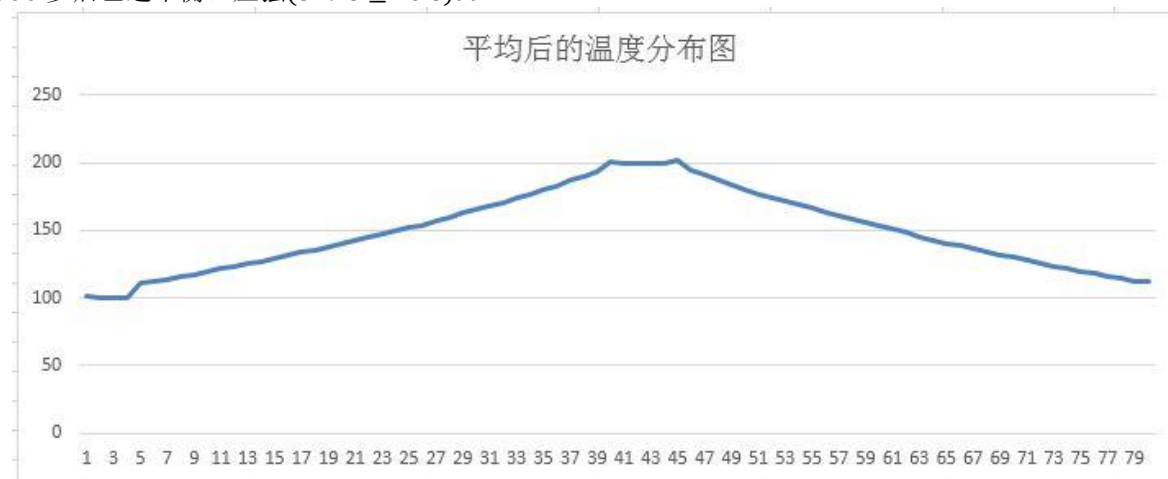


3.rho=0.6，前面已经做过。略。直接把图粘贴过来。



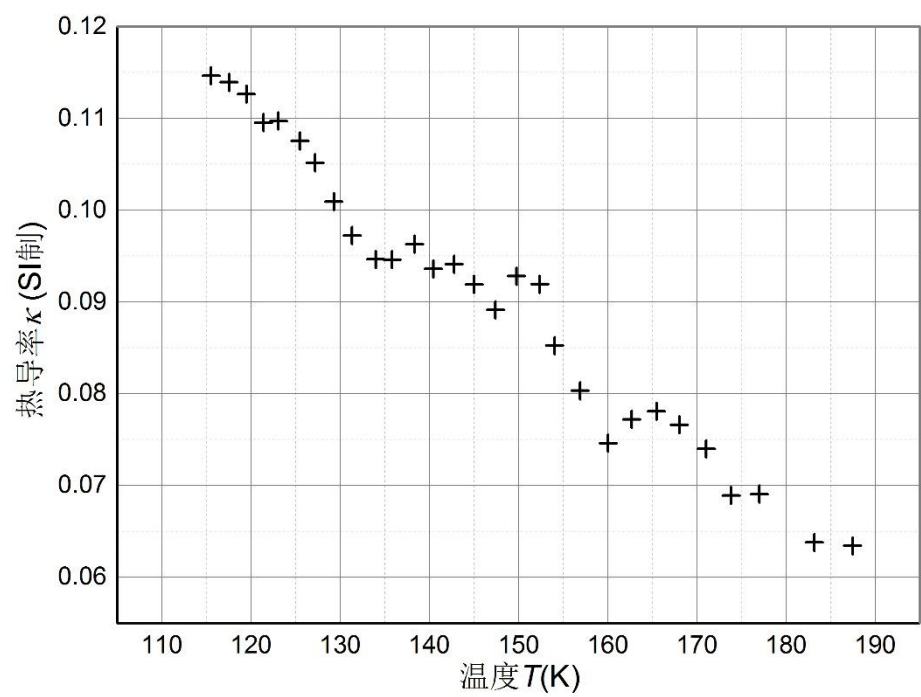
4. $\rho=0.7$

10000 步后已达平衡。压强(549.3 ± 20.8)atm.



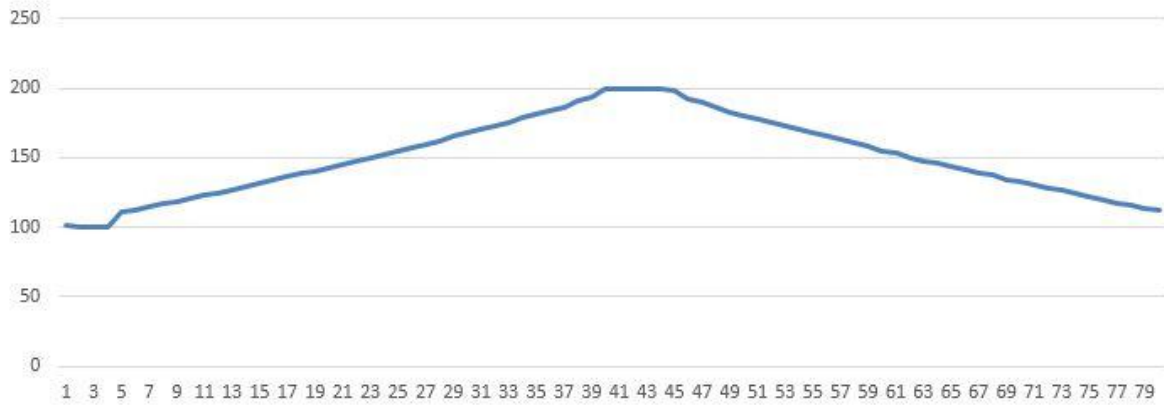
层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	115.5277	2.006698	1.2248E+10	3.6744E+09	0.114646	0.035207
9	117.5282	1.802309	1.2323E+10	3.8418E+09	0.113945	0.0363
10	119.4799	2.020561	1.2465E+10	3.8513E+09	0.11265	0.035582
11	121.4033	2.083145	1.2818E+10	3.7507E+09	0.109549	0.032852
12	123.0752	1.632374	1.2797E+10	4.0764E+09	0.109723	0.035684
13	125.4841	1.791766	1.3055E+10	4.1837E+09	0.107556	0.035182
14	127.1775	1.910948	1.3353E+10	3.8235E+09	0.105158	0.030891
15	129.2864	2.053325	1.3914E+10	4.0916E+09	0.100919	0.030406
16	131.3348	1.985825	1.4441E+10	4.8211E+09	0.097236	0.033083
17	133.993	2.141064	1.4838E+10	4.6426E+09	0.094634	0.030253
18	135.8128	2.757988	1.4843E+10	4.4190E+09	0.094602	0.028841

19	138.3382	2.318728	1.4584E+10	4.9170E+09	0.096281	0.03307
20	140.4568	2.207545	1.5002E+10	5.5209E+09	0.093599	0.034989
21	142.7685	2.508964	1.4920E+10	5.5154E+09	0.094111	0.035332
22	145.0131	2.669224	1.5277E+10	5.5892E+09	0.091914	0.034164
23	147.4135	3.039386	1.5752E+10	5.7704E+09	0.089142	0.033175
24	149.7591	3.054749	1.5130E+10	5.8862E+09	0.092809	0.036617
25	152.3819	2.978436	1.5275E+10	6.2559E+09	0.091929	0.03813
26	154.0417	2.899972	1.6472E+10	6.1005E+09	0.085244	0.032061
27	156.8952	2.997897	1.7482E+10	6.4130E+09	0.080321	0.029932
28	160.0369	2.784368	1.8820E+10	6.3287E+09	0.074609	0.025562
29	162.687	3.301751	1.8189E+10	6.2392E+09	0.0772	0.026961
30	165.4669	3.132008	1.7985E+10	6.2255E+09	0.078073	0.027506
31	168.0207	3.026885	1.8327E+10	6.5635E+09	0.076617	0.027895
32	171.0557	3.110069	1.8980E+10	6.3095E+09	0.073983	0.025069
33	173.8384	3.028535	2.0375E+10	6.0969E+09	0.068917	0.021112
34	177.0004	2.942419	2.0334E+10	6.1827E+09	0.069057	0.021481
35	183.1713	2.86768	2.2015E+10	6.4571E+09	0.063784	0.019171
36	183.1713	2.86768	2.2015E+10	6.4571E+09	0.063784	0.019171
37	187.4449	3.324044	2.2141E+10	6.4671E+09	0.06342	0.018986

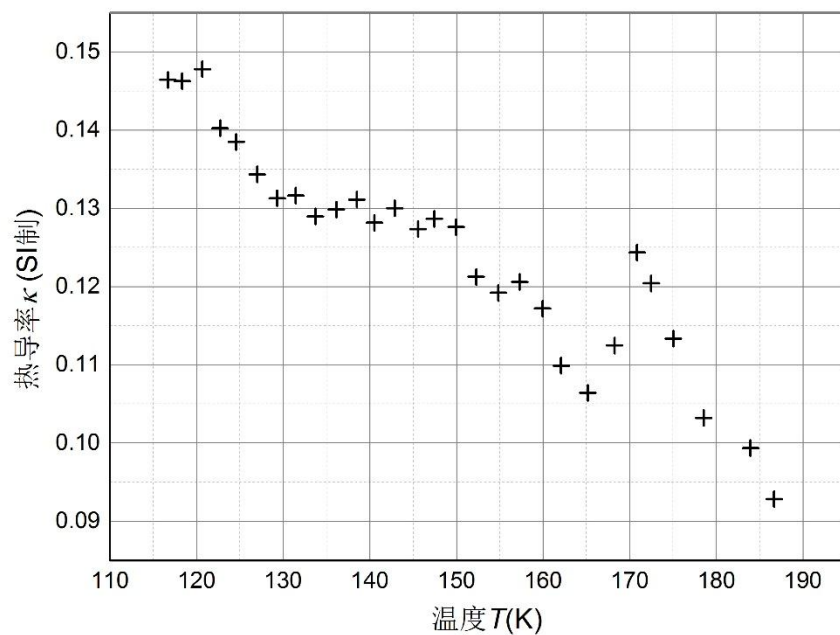


5. rho=0.8
压强(1193.6 ± 24.8)atm.

平均后的温度分布图



层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	116.6883	1.412889	1.3982E+10	3.4262E+09	0.146427	0.037248
9	118.3428	1.551091	1.3999E+10	3.5908E+09	0.146245	0.038818
10	120.6887	1.693374	1.3854E+10	3.9028E+09	0.147781	0.042837
11	122.7138	1.917318	1.4600E+10	4.0845E+09	0.140233	0.040385
12	124.5859	2.133454	1.4784E+10	4.0519E+09	0.138482	0.039115
13	127.02	2.139303	1.5241E+10	4.3433E+09	0.134333	0.039366
14	129.2957	1.940653	1.5597E+10	4.7815E+09	0.131264	0.041228
15	131.4513	2.058352	1.5554E+10	4.8310E+09	0.131625	0.041858
16	133.7219	2.314248	1.5877E+10	4.5933E+09	0.128947	0.038329
17	136.1275	2.346372	1.5767E+10	4.7344E+09	0.129848	0.039985
18	138.5133	2.230258	1.5614E+10	5.2713E+09	0.131126	0.045166
19	140.5311	2.248067	1.5976E+10	5.5322E+09	0.128153	0.045232
20	142.8838	2.592904	1.5748E+10	5.4238E+09	0.130007	0.045648
21	145.5695	2.789616	1.6078E+10	5.3742E+09	0.127337	0.043442
22	147.4556	2.720266	1.5913E+10	5.4902E+09	0.128659	0.04525
23	149.9471	2.591259	1.6044E+10	5.9137E+09	0.127605	0.047833
24	152.2767	2.370553	1.6889E+10	5.9550E+09	0.121222	0.043536
25	154.8363	2.736418	1.7178E+10	5.5749E+09	0.119183	0.039526
26	157.3032	2.798878	1.6979E+10	5.7818E+09	0.120578	0.041876
27	159.9362	2.526887	1.7473E+10	6.5282E+09	0.117174	0.044504
28	162.0845	2.935934	1.8630E+10	6.2171E+09	0.109896	0.037434
29	165.1624	3.31262	1.9240E+10	5.7928E+09	0.106413	0.032853
30	168.249	2.881161	1.8205E+10	6.5010E+09	0.11246	0.040887
31	170.8568	2.675791	1.6463E+10	6.4311E+09	0.124361	0.049317
32	172.4872	3.038677	1.7004E+10	6.2315E+09	0.120404	0.044884
33	175.0252	2.559466	1.8063E+10	6.8441E+09	0.113347	0.04364
34	178.5404	2.973257	1.9840E+10	6.7521E+09	0.103194	0.035821
35	183.9511	3.161508	2.0607E+10	7.2796E+09	0.099351	0.035746
36	183.9511	3.161508	2.0607E+10	7.2796E+09	0.099351	0.035746
37	186.6863	2.915626	2.2055E+10	7.2580E+09	0.092829	0.031199



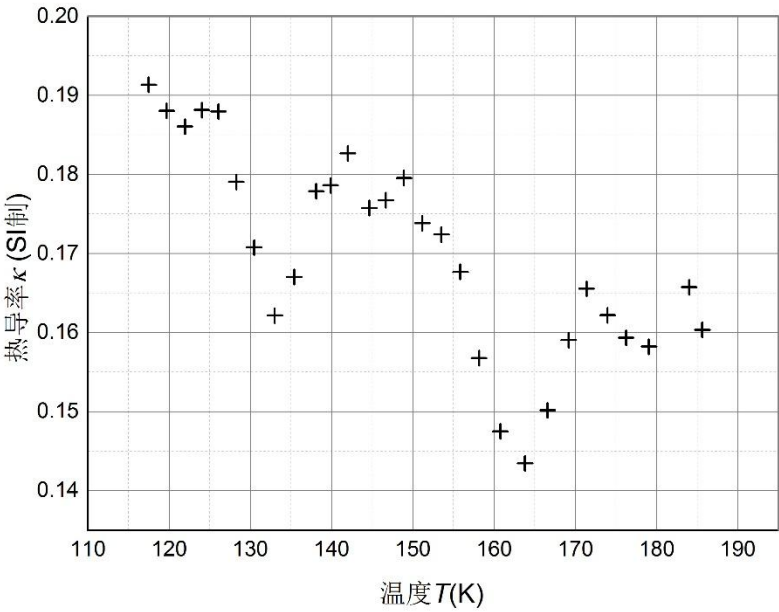
6. $\rho=0.9$

压强 (2397.5 ± 37.3) atm。



层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	117.4862	1.541305	1.4920E+10	3.9582E+09	0.191322	0.052128
9	119.692	1.955578	1.5180E+10	4.1333E+09	0.188049	0.052517
10	121.9361	1.985831	1.5343E+10	4.3629E+09	0.18605	0.054151
11	124.0271	1.970619	1.5172E+10	4.9590E+09	0.18814	0.062592
12	126.0553	2.240287	1.5188E+10	4.9879E+09	0.187947	0.062817
13	128.2498	2.444935	1.5943E+10	4.7582E+09	0.179044	0.05458
14	130.4531	2.403045	1.6716E+10	5.1964E+09	0.170762	0.05413
15	132.9851	2.122637	1.7606E+10	5.0885E+09	0.162135	0.047929
16	135.3857	2.362945	1.7090E+10	5.0329E+09	0.167025	0.050268
17	138.1039	1.965295	1.6050E+10	4.6826E+09	0.177856	0.053053
18	139.8533	2.130176	1.5982E+10	4.9566E+09	0.178608	0.056491
19	141.9826	1.924001	1.5628E+10	4.5199E+09	0.182656	0.054031
20	144.6304	2.134536	1.6244E+10	4.7010E+09	0.175733	0.052015
21	146.6516	1.966851	1.6153E+10	4.5854E+09	0.176719	0.051351
22	148.8859	2.095652	1.5899E+10	4.6989E+09	0.179543	0.054222
23	151.1585	2.087488	1.6423E+10	4.6743E+09	0.173817	0.050636

24	153.5028	2.04937	1.6557E+10	5.1487E+09	0.172408	0.054672
25	155.8355	2.164081	1.7025E+10	4.9348E+09	0.167669	0.049702
26	158.1337	2.515838	1.8209E+10	4.5299E+09	0.156762	0.040193
27	160.7568	2.221583	1.9355E+10	5.2005E+09	0.147479	0.040669
28	163.7848	1.855801	1.9899E+10	5.5976E+09	0.14345	0.041323
29	166.5546	2.473312	1.9010E+10	5.5526E+09	0.150161	0.04484
30	169.16	2.500287	1.7949E+10	5.0463E+09	0.159033	0.045787
31	171.3721	2.781897	1.7244E+10	5.6357E+09	0.16554	0.05507
32	173.9368	2.358403	1.7600E+10	6.4437E+09	0.162185	0.060225
33	176.2332	2.546157	1.7915E+10	6.7640E+09	0.159334	0.060964
34	179.046	3.244405	1.8044E+10	6.4953E+09	0.158198	0.057787
35	184.0031	3.288826	1.7226E+10	7.3643E+09	0.165712	0.071587
36	184.0031	3.288826	1.7226E+10	7.3643E+09	0.165712	0.071587
37	185.608	3.004875	1.7803E+10	7.2598E+09	0.160341	0.066139

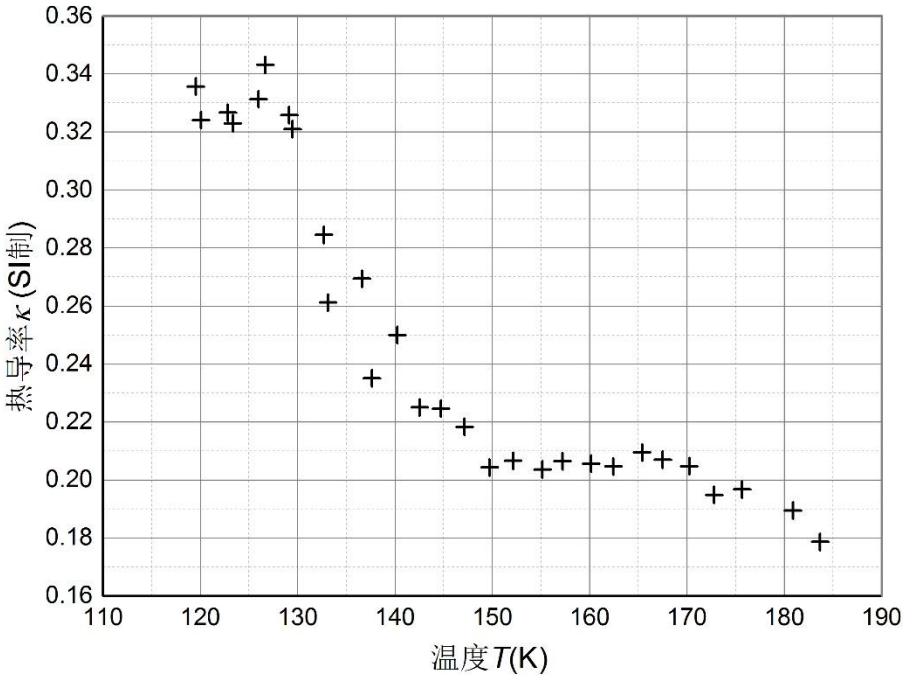


7. rho=1.0
压强(3575.5 ± 47.1).



层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	119.5347	1.777563	1.1649E+10	4.8640E+09	0.335692	0.140693

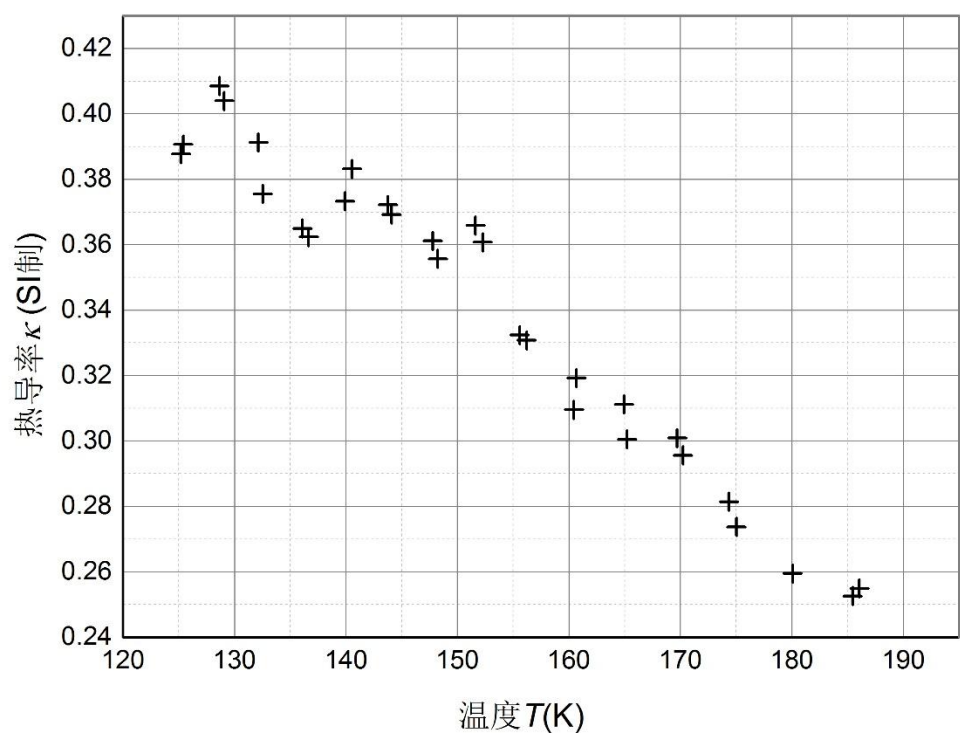
9	120.0686	1.387479	1.2065E+10	3.9354E+09	0.324105	0.106362
10	122.8201	1.533535	1.1971E+10	4.2365E+09	0.32665	0.116197
11	123.3394	1.739898	1.2106E+10	4.3607E+09	0.323015	0.116936
12	125.9876	1.948069	1.1803E+10	4.3651E+09	0.331303	0.123106
13	126.6642	2.284421	1.1395E+10	5.1299E+09	0.343176	0.154992
14	129.1325	2.069919	1.2003E+10	4.8343E+09	0.32578	0.131734
15	129.4659	2.639249	1.2184E+10	6.0095E+09	0.320938	0.158715
16	132.6967	1.956342	1.3745E+10	5.1814E+09	0.284496	0.107736
17	133.1144	3.039591	1.4974E+10	5.6637E+09	0.261149	0.099226
18	136.595	1.979779	1.4518E+10	4.9311E+09	0.269346	0.091999
19	137.6338	2.395996	1.6637E+10	6.6386E+09	0.235053	0.094179
20	140.2462	1.878187	1.5643E+10	4.8169E+09	0.249985	0.077506
21	142.529	3.002822	1.7381E+10	5.5496E+09	0.22498	0.072292
22	144.7162	1.726992	1.7413E+10	5.3386E+09	0.224572	0.069328
23	147.1422	2.586652	1.7912E+10	6.5197E+09	0.218313	0.079853
24	149.7044	2.357056	1.9138E+10	4.8146E+09	0.204325	0.051929
25	152.137	2.872678	1.8933E+10	6.0093E+09	0.206547	0.065983
26	155.1494	1.965466	1.9210E+10	5.9334E+09	0.20356	0.063302
27	157.2113	2.727472	1.8941E+10	6.2278E+09	0.206455	0.068292
28	160.1465	2.567525	1.9018E+10	5.4993E+09	0.205619	0.05992
29	162.4357	2.615148	1.9109E+10	6.4641E+09	0.20464	0.069618
30	165.3864	2.524406	1.8668E+10	6.4645E+09	0.20947	0.07293
31	167.5021	2.897167	1.8895E+10	6.3914E+09	0.206952	0.070401
32	170.2264	2.945515	1.9103E+10	5.9429E+09	0.2047	0.064109
33	172.7823	2.836644	2.0071E+10	6.4765E+09	0.194829	0.06326
34	175.6533	2.374778	1.9885E+10	6.1574E+09	0.196654	0.061308
35	180.8778	2.196744	2.0643E+10	6.0134E+09	0.189437	0.055608
36	180.8778	2.196744	2.0643E+10	6.0134E+09	0.189437	0.055608
37	183.6682	2.179957	2.1900E+10	5.8256E+09	0.178563	0.047937



8. rho=1.1
压强(5469.9 ± 52.0)atm.

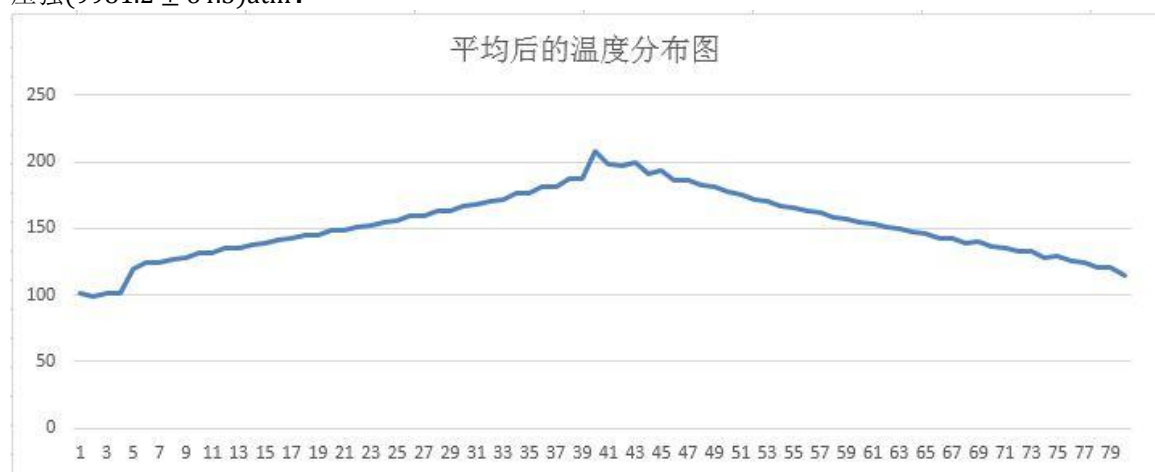


层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	125.1954	1.817596	1.4140E+10	4.1032E+09	0.38772	0.113605
9	125.4012	1.581893	1.4034E+10	3.5207E+09	0.390642	0.099274
10	128.6599	1.837395	1.3420E+10	4.1183E+09	0.408522	0.126457
11	129.0731	1.438862	1.3571E+10	3.7326E+09	0.403968	0.11231
12	132.1429	1.678859	1.4012E+10	4.1496E+09	0.391269	0.116958
13	132.5421	1.384693	1.4599E+10	4.0626E+09	0.375516	0.105601
14	136.0961	1.733013	1.5022E+10	4.3481E+09	0.364953	0.10667
15	136.6519	1.882716	1.5131E+10	4.0166E+09	0.362319	0.097296
16	139.92	1.978663	1.4687E+10	4.3155E+09	0.373277	0.110721
17	140.5337	1.8067	1.4307E+10	4.3214E+09	0.383178	0.116774
18	143.768	1.808981	1.4731E+10	4.3956E+09	0.372157	0.112068
19	144.0922	1.630454	1.4848E+10	4.4972E+09	0.369227	0.11283
20	147.7824	1.697373	1.5179E+10	4.5029E+09	0.361178	0.108141
21	148.2447	1.965006	1.5413E+10	4.6700E+09	0.355686	0.108729
22	151.6265	1.945106	1.4984E+10	4.5811E+09	0.365884	0.112846
23	152.2583	2.240071	1.5198E+10	4.8733E+09	0.360731	0.116594
24	155.5825	1.972177	1.6496E+10	4.9480E+09	0.332344	0.100595
25	156.2137	2.096236	1.6575E+10	5.2957E+09	0.33076	0.106526
26	160.4455	2.085982	1.7713E+10	5.2078E+09	0.309505	0.09186
27	160.6752	2.221584	1.7172E+10	5.4280E+09	0.31926	0.101746
28	164.9452	2.323034	1.7618E+10	5.3026E+09	0.311176	0.094504
29	165.2031	2.406332	1.8242E+10	5.4742E+09	0.300528	0.091005
30	169.7128	2.238845	1.8221E+10	5.2444E+09	0.300879	0.087457
31	170.2311	2.302129	1.8546E+10	5.4498E+09	0.295602	0.087687
32	174.3569	1.900865	1.9483E+10	5.5587E+09	0.281394	0.081094
33	175.0197	2.185482	2.0031E+10	5.7001E+09	0.273695	0.078673
34	180.0701	2.388591	2.1129E+10	5.8623E+09	0.259466	0.072755
35	185.4536	2.88836	2.1706E+10	6.6915E+09	0.252568	0.078532
36	185.4536	2.88836	2.1706E+10	6.6915E+09	0.252568	0.078532
37	186.0612	2.663042	2.1503E+10	6.2302E+09	0.25495	0.074588



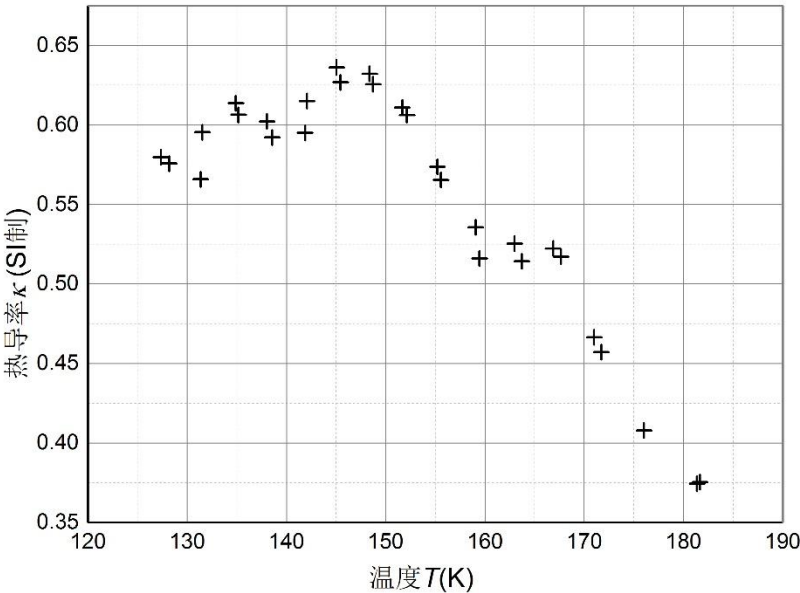
9. $\rho=1.2$

压强 $(9981.2 \pm 64.3) atm.$

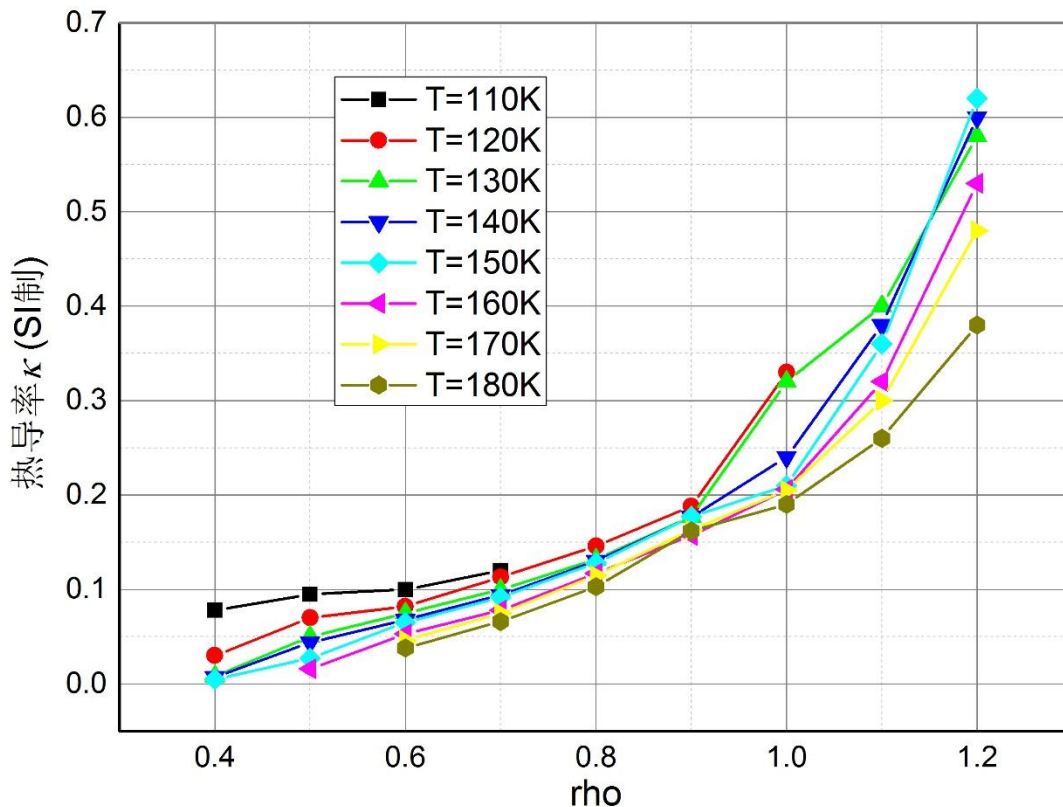


层编号	温度	标准差	温度梯度	标准差	热导率	标准差
8	127.3453	2.05268	1.4156E+10	5.3200E+09	0.579634	0.21896
9	128.1835	1.982863	1.4253E+10	4.6648E+09	0.575699	0.189705
10	131.352	2.126088	1.4502E+10	5.4153E+09	0.565809	0.21239
11	131.518	2.087858	1.3781E+10	5.0245E+09	0.59542	0.218287
12	134.8983	2.359694	1.3371E+10	5.6948E+09	0.613672	0.262423
13	135.1721	1.93689	1.3531E+10	5.6974E+09	0.606409	0.256392
14	138.0261	2.56161	1.3623E+10	5.9895E+09	0.602299	0.265801
15	138.5572	2.393811	1.3857E+10	5.3329E+09	0.592151	0.229017
16	141.8675	2.561825	1.3790E+10	6.1739E+09	0.595018	0.267367
17	142.0616	2.112725	1.3341E+10	5.8096E+09	0.615034	0.268858
18	145.0416	2.50963	1.2897E+10	5.7371E+09	0.636212	0.284055
19	145.4525	2.167528	1.3090E+10	5.3400E+09	0.626835	0.256838
20	148.3721	2.109947	1.2978E+10	5.9128E+09	0.632225	0.289048
21	148.719	2.091935	1.3115E+10	5.4840E+09	0.625643	0.262703

22	151.6601	2.359222	1.3429E+10	5.6140E+09	0.61102	0.256509
23	152.147	2.225855	1.3534E+10	5.2242E+09	0.606294	0.235188
24	155.1962	2.440485	1.4302E+10	5.4946E+09	0.573734	0.221519
25	155.5556	1.943156	1.4512E+10	5.5114E+09	0.5654	0.215812
26	159.0487	2.110924	1.5318E+10	6.1622E+09	0.535655	0.216455
27	159.4477	2.172938	1.5901E+10	5.5576E+09	0.516013	0.181429
28	162.9895	2.696237	1.5617E+10	6.7000E+09	0.525409	0.226306
29	163.6953	2.403863	1.5954E+10	6.4206E+09	0.514301	0.207909
30	166.8542	3.326455	1.5711E+10	7.2865E+09	0.522266	0.243043
31	167.6591	2.712784	1.5864E+10	6.7432E+09	0.517244	0.220759
32	170.9966	3.302772	1.7592E+10	8.3064E+09	0.466431	0.220962
33	171.7102	2.666332	1.7947E+10	7.5437E+09	0.457186	0.19296
34	176.0135	3.634398	2.0116E+10	8.5746E+09	0.407906	0.174576
35	181.3605	3.825153	2.1916E+10	9.0237E+09	0.374407	0.154827
36	181.3605	3.825153	2.1916E+10	9.0237E+09	0.374407	0.154827
37	181.6582	3.538395	2.1861E+10	8.3843E+09	0.375333	0.144664



10. rho=1.3 以上
- 开始出现个别区域内有时无原子的现象。导致温度等统计量出现 0 的数据，从而严重影响最后结果的可靠性。这可能也是前面取 rho=1.414 时结果很不理想的原因。
- 遇到这种情况，需要减小区域划分的总数目，以保证每个区域内都有原子存在。这样的话需要改动输入文件并重新运算，这里略去。
11. 根据以上各组数据，从各个 rho 值的图象中估计某些温度下的热导率值。可以得到这些温度下，热导率随 rho 的变化曲线。



结论：可以看出，热导率随 ρ 是明显增大的。且受 ρ 取值的影响很大。大约在 ρ 取值为 0.7 至 0.85 时，能得到比较接近所谓标准值 0.125 的结果。恰好上届同学的报告取的 ρ 值也为 0.85，在这个范围内。而我们初步运行原始文件时，仅仅因为 ρ 取的是 0.6，所以比标准值偏小了约一半（当时结果也许是接近标准值，但是是因为碰巧忘了除以一个 2）。

也正因为热导率受 ρ 的影响很大，所以冷热两区温差设成这么大似乎也是不合理的。因为这样将直接导致热区 ρ 比设定值小，而冷区 ρ 比设定值大。而 ρ 大的地方热导率也大，这样在以上各图中所呈现的热导率随温度升高而下降的趋势可能也仅仅是由 ρ 的差异导致，而不是真正由温度变化导致的。

然而减小温差又将导致温度梯度减小，从而所求得热导率的标准差比较大。所以有必要再重新探究一下合理的温差设置方案。

注：由于主要目的探究“固体”氩的热导率，所以实际上可能还需要继续降低温度。但是在前面降低温度时，选取的 ρ 值并不好。同时在低温时出现一些区域内无原子的现象。这说明取四分之一晶格厚度作为一个区域这种做法是不保险的，一旦出现某些时刻个别区域无原子的情况，统计量将会出现 0 的数据，这时将直接导致所求得的热导率等平均值偏小。为此，后面将改成取半个晶格厚度作为一个区域，即原始文件的设置方法。修改后的输入文件见附录二。

六、本部分总结

综上所述，这一部分又是失败的尝试。原因主要在于还没能找到合适的温差，以尽量避免 ρ 值分布不均匀对热导率计算结果的干扰。这在 `mullerplathe` 中应该是类似的，能量交换快则温差大，有利于得到标准差较小的较精确的结果；但同时因为温差导致 ρ 的分布不均匀，将导致结果的可靠程度下降；同时温差大，将难以确定所得的结果究竟是哪个温度下的热导率，也会导致结果的可靠程度下降。

这个问题要想解决仍需不少时间，所以暂时跳过这个问题，先用最易得到结果的 `greenkubo` 方法探究一下热导率随温度、 ρ 以及体系大小的关系。

第三部分：greenkubo 文件

一、对原始文件的修改

1. 将 p 增大、 s 减小，以使积分值更精确。

```
variable    p equal 10000    # correlation length
variable    s equal 1        # sample interval
```

2. 为方便起见，温度的输入值可以以 K 为单位，然后自动进行单位换算。例如下面表示温度为 100K。

#单位换算

```
variable      SI_T equal 8.347246383e-3      #数值关系T'=T*Kb/epsilon&
              =T*1.380650524e-23/(0.0103235761*1.6021765314e-19)&
              =T*8.347246383e-3. (T单位为K)。单位：1.0对应119.799986K。
```

```
variable      t equal 100*${SI_T}
```

3.thermo中添加kappa值和压强值的输出。（若压强小于0，说明体系本身不稳定，应增大rho或温度取值）

```
variable      kappa equal (trap(f_JJ[3])+trap(f_JJ[4])+trap(f_JJ[5]))*${scale}/3.0
```

```
thermo_style  custom step temp v_Jx v_Jy v_Jz v_k11 v_k22 v_k33 v_kappa
```

4.修改后的thermo文件见附录3。

二、初始参数下，试运行

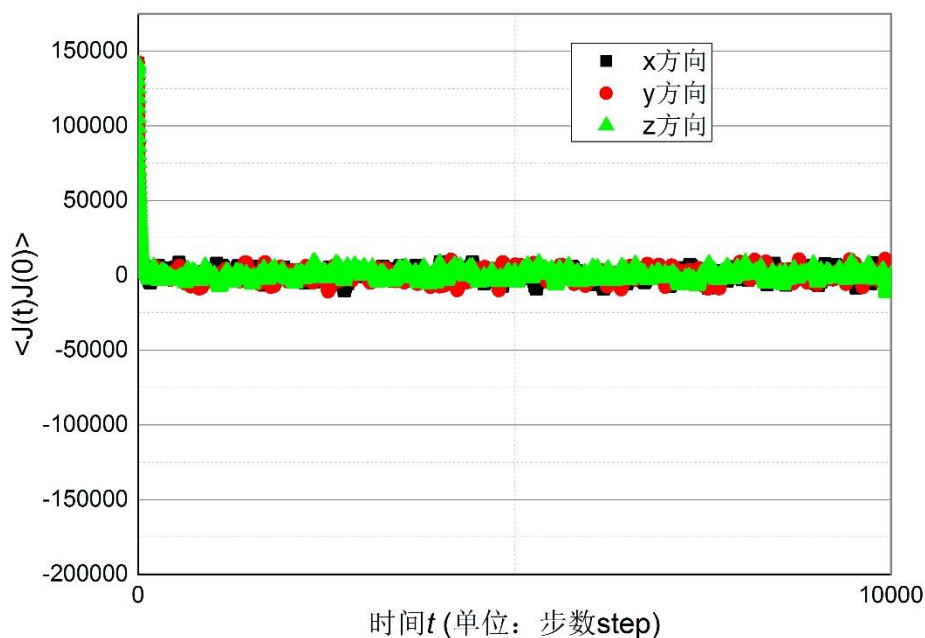
rho=0.6, T=100K.

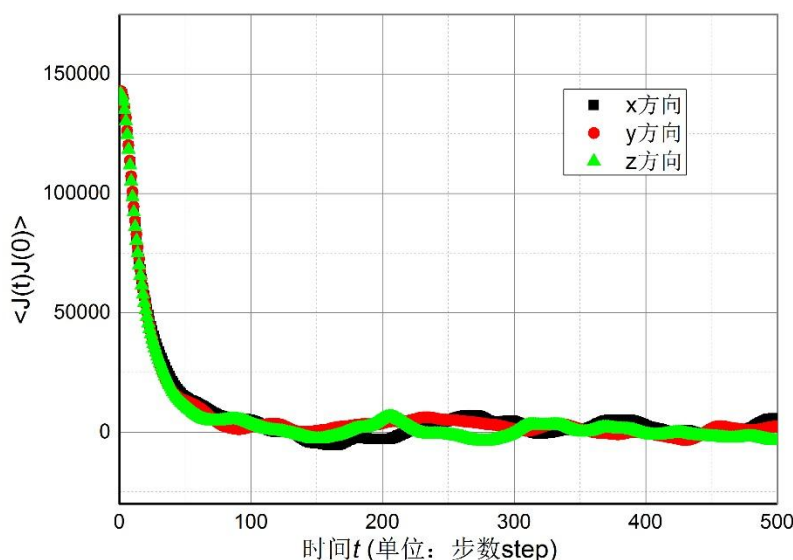
为了减少运算时间，步数减小为40000步（原100000步），减小步数对精确度、准确度的不利影响可以通过在不同随机数seed设置下多次运行取平均来抵消。

随机数 seed 依次设为 1 至 5.

以 seed 为 1 的结果为例：

热流自关联函数随时间的关系如下图。





不同随机数下，所得结果如下：（1j 单位）

Seed	1	2	3	4	5
热导率	6.65832284910344	11.5959778516561	3.34328141238446	4.31979358236375	1.31267892029578

因为是初次试运算，所以设置的步数较少，随机数更改次数也较少。

以后进一步精确计算时再增大步数和随机数个数。

热导率的不确定度取为 $N=5$ 次结果的标准差再乘上 $\sqrt{\frac{N}{N-1}}$ 。

结果：热导率 (5.4 ± 4.4) ，化为 SI 制为 (0.10 ± 0.08) ，单位略。

数量级基本正确，但是不确定度与结果在同一数量级，说明还很有必要想办法减小不确定度。有以下几种方案：第一，增加原子数，但因为原子数也可能会影响实际的热导率，所以不宜通过增加原子数来减小不确定度；第二，增加运行总步数；第三，增加重复试验次数。

主要需要在第二、第三之间权衡。考虑到增加重复试验次数基本上不会增加单个参数下运算的总时间，因为可以并行计算，但鉴于目前还不会写 shell 文件，只能通过同时打开多个 putty 窗口实现，一般来说打开窗口不宜超过 10 个，否则操作起来耗时很多。所以先将重复试验次数增大到 10 次。总步数也先改回 100000 步。看看不确定度能减小到什么程度。

这次的结果为

Seed	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
热导率	4.38235 72	7.16709 73	3.38160 43	5.30846 38	3.48142 49	4.28645 14	1.84886 65	7.37270 51	2.64248 99	5.67860 14

热导率 (4.6 ± 1.9) ，化为 SI 制为 (0.09 ± 0.04) ，单位略。

标准差仍然较大。但同时也发现另外两个问题，一个是此参数下压强略小于 0，约为 $(-28 \pm 13)\text{atm}$ ，体系本身是不稳定的。运行时温度也偏离了原始的设置，为 $(105.9 \pm 1.5)\text{K}$ ，而设定值是 100K，偏离较严重。这可能说明前面的 nvt 过程设置还不够合理。

尝试以下修改：nvt 步数增加至 5000 步，且相应的 Tdamp 值减小为 timestep 值的 10 倍，即 0.05（这是第一次作业对方法一 thermostat 中 nvt 过程的优化结果）。

结果温度仍然偏大，于是停止运算。先想办法解决温度偏离的问题。

测试过程略，方法是仅保留 nvt 和 nve 过程，删掉其他内容。

测试的结论是：（1）原始的 nvt 过程 Tdamp 值过大，导致 nvt 过程达平衡所需时间较长。（2）原始的 nvt 步数过短，导致体系尚未达到平衡。

经测试，选定 nvt 步数为 10000 步，Tdamp 值改为 0.05。在该条件下，nvt 过程之后的 nve 过程中温度基本能保证在设定值上下波动，而不是出现明显偏大或偏小的现象。至此，修改后的输入文件见附录 4。

再次做以上体系，结果如下：

Seed	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
热导率	4.35812 6	6.64179 98	4.30651 89	10.8740 1	4.72548 56	4.17089 36	4.70488 7	4.11310 4	2.76697 06	4.74441 49

热导率(5.1 ± 2.3), 化为 SI 制为 (0.097 ± 0.044), 单位略。

压强为(-38 ± 20)atm, 体系本身仍然是不稳定的。温度为(100.9 ± 1.4)K, 而设定值是 100K, 符合设定的要求。

三、先探究一下压强与rho、温度的关系

之所以先确定压强、rho、温度三者的关系, 是因为一般来说在压强小于0的条件下, 体系是不稳定的, 或者说原子有内聚的趋势, 有可能导致部分区域内无原子的异常现象; 又由于原子内聚, 将导致实际的rho值大于设定值, 以及破坏设定的周期性边界条件, 原子分布不再连续。

为了避免出现压强小于0的参数设置, 至少需要先确定压强为0时温度与rho的对应关系。以便后面选取合适参数。

本人认为这个步骤对于判断某温度、rho下体系是否稳定, 及其所处状态为固态、液态还是气态都是有帮助的。

另外, 以此为依据, 后面在探究热导率随温度变化关系时, 不仅可以固定rho, 还可以考虑固定压强。

所以个人认为这一步骤是有必要的。

方法是采用npt过程, 控制压强、温度, 测试平衡时对应的rho值。

输入文件内容如下:

#单位换算

```
variable      SI_T equal 8.347246383e-3    #数值关系T'=T*Kb/epsilon&
                                     =T*1.380650524e-23/(0.0103235761*1.6021765314e-19)&
                                     =T*8.347246383e-3. (T单位为K)。单位: 1.0对应119.799986K。
```

```
variable      atm_p equal 1/413.4971954    #数值关系p'=p*sigma^3/epsilon&
                                     =p*(3.405e-10)^3/(0.0103235761*1.6021765314e-19)&
                                     =p*2.386771368e-8. (p单位为Pa, 标准大气压101325Pa)。&
                                     单位: 1.0对应4.189760332e7Pa, 或413.4971954标准大气压。
```

settings

```
variable x equal 10
variable y equal 10
variable z equal 10
```

```
variable rho equal 0.8
variable      t equal 100*${SI_T}
variable      p equal 0*${atm_p}
variable rc equal 2.5
variable seed equal 10
```

setup problem

```
units          lj
atom_style      atomic
```

```
lattice         fcc ${rho}
region          box block 0 $x 0 $y 0 $z
create_box      1 box
create_atoms    1 box
mass            1 1.0
```

```
velocity all create $t ${seed}
```

```
pair_style          lj/cut ${rc}
pair_coeff           1 1 1.0 1.0

neighbor 0.3 bin
neigh_modify        delay 0 every 1

fix 1 all box/relax iso $p nreset 1
min_style cg
minimize 3e-14 3e-14 1000000 1000000  #第一次优化
minimize 1e-14 1e-14 1000000 1000000  #第二次优化
#优化完成，最低势能结构
unfix 1
reset_timestep 0

# npt
fix p1 all npt temp $t $t 0.05 iso $p $p 0.5
variable rho_now equal 4/(lz/10)/(lz/10)/(lz/10)

thermo              100
thermo_style         custom step temp press lz v_rho_now

run                  10000
```

运行结果：

注：对固体，压强很难精确控制，标准差很大。

例如，压强0.1atm，温度30K（固态）条件下，实际运行温度(30.0 ± 0.4)K，而压强(5 ± 26)atm. 个人认为这是由固体本身的性质决定的，调节Tdamp等参数并不等有效改善这一现象，所以忽略其影响。

在两次“相变”的中间状态（猜测是液态）下，压强同样不易控制。例如，压强0.1atm，温度100K（可能是液态）条件下，实际运行温度(100.1 ± 1.1)K，而压强(6 ± 24)atm.

在气态时，压强可以控制得比较好。例如，压强0.1atm，温度150K（气态）条件下，实际运行温度(150 ± 2)K，而压强(0.100 ± 0.002)atm.

或者压强较大时，压强也可以控制的较好。例如，压强增至100atm时，温度80K（固态）条件下，实际运行温度(80.1 ± 1.0)K，而压强(101 ± 34)atm.

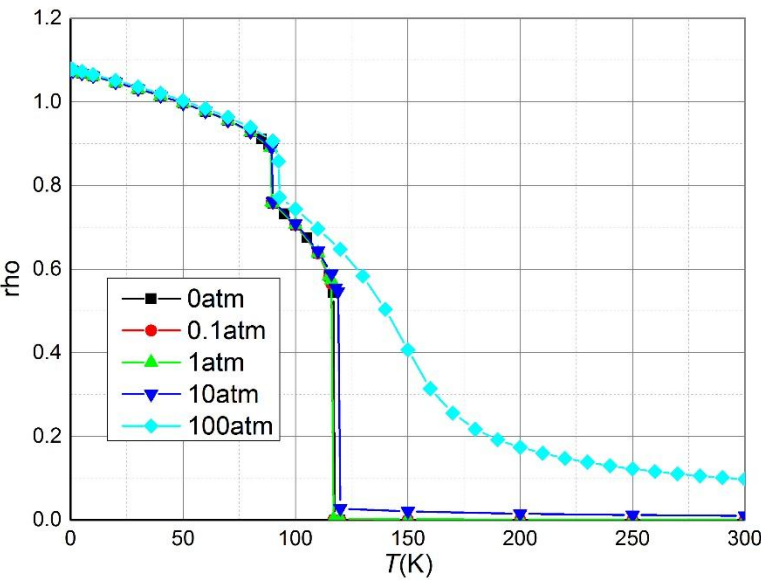
压强（atm）	温度（K）	rho（lj单位）	rho的标准差	备注
0	0	1.0749748	-	零温下结构优化结果
0	1	1.073730107	0.000327645	从1000步开始统计。
0	5	1.068559787	0.000505177	
0	10	1.061553968	0.000571811	
0	20	1.046578375	0.000945256	
0	30	1.031119375	0.001225894	
0	40	1.014642313	0.001329624	
0	50	0.996825292	0.001863249	
0	60	0.97741339	0.002027543	
0	70	0.955328045	0.00241189	
0	80	0.92819372	0.002768051	
0	85	0.910910292	0.003358156	
0	88	0.898114341	0.003210314	

0	89	0.891893507	0.003773532	附近可能固液相变
0	89.5	0.761183312	0.003570552	统计起点改为2000步。
0	90	0.757550331	0.004187575	
0	95	0.732236459	0.003707161	
0	100	0.705665023	0.004222214	
0	105	0.674873319	0.005334124	
0	110	0.637242874	0.006170213	
0	115	0.58446731	0.008659923	
0	117	0.54426423	0.011316868	
0	117.5	先缓慢后迅速趋于0	-	附近可能液气相变
0	118	趋于0	-	
0	120	趋于0	-	
0.1	0	1.0749785	-	零温下结构优化结果
0.1	1	1.073735101	0.000323482	
0.1	5	1.06858208	0.00050836	
0.1	10	1.061541305	0.000587596	
0.1	20	1.046584938	0.000999662	
0.1	30	1.031206337	0.001263017	
0.1	40	1.014374319	0.00161027	
0.1	50	0.997034935	0.001537354	
0.1	60	0.977396646	0.001921086	
0.1	70	0.955051537	0.00212989	
0.1	80	0.928375555	0.002752082	
0.1	89	0.89255764	0.003556727	附近可能固液相变
0.1	89.5	0.759931803	0.003536933	
0.1	90	0.757436981	0.003796537	
0.1	100	0.705401006	0.004470651	
0.1	110	0.637736194	0.006683728	
0.1	115	0.579648892	0.006910068	
0.1	116	0.564759708	0.008869131	附近可能液气相变
0.1	117	0.000248666	3.82868E-06	约15200步达平衡。统计20000至30000步数据。
0.1	120	0.000241932	3.92793E-06	
0.1	150	0.000193261	2.79414E-06	
0.1	200	0.000144907	2.28085E-06	
0.1	250	0.000115947	1.79196E-06	
0.1	300	9.65825E-05	1.46563E-06	
1	0	1.0750121	-	零温下结构优化结果
1	1	1.073764759	0.000332956	
1	5	1.06864383	0.000394041	
1	10	1.061600899	0.000668492	
1	20	1.046619759	0.000972594	
1	30	1.031009291	0.001307754	
1	40	1.01466303	0.001321263	
1	50	0.997054602	0.001534455	
1	60	0.977597976	0.001835688	
1	70	0.955302146	0.002075655	

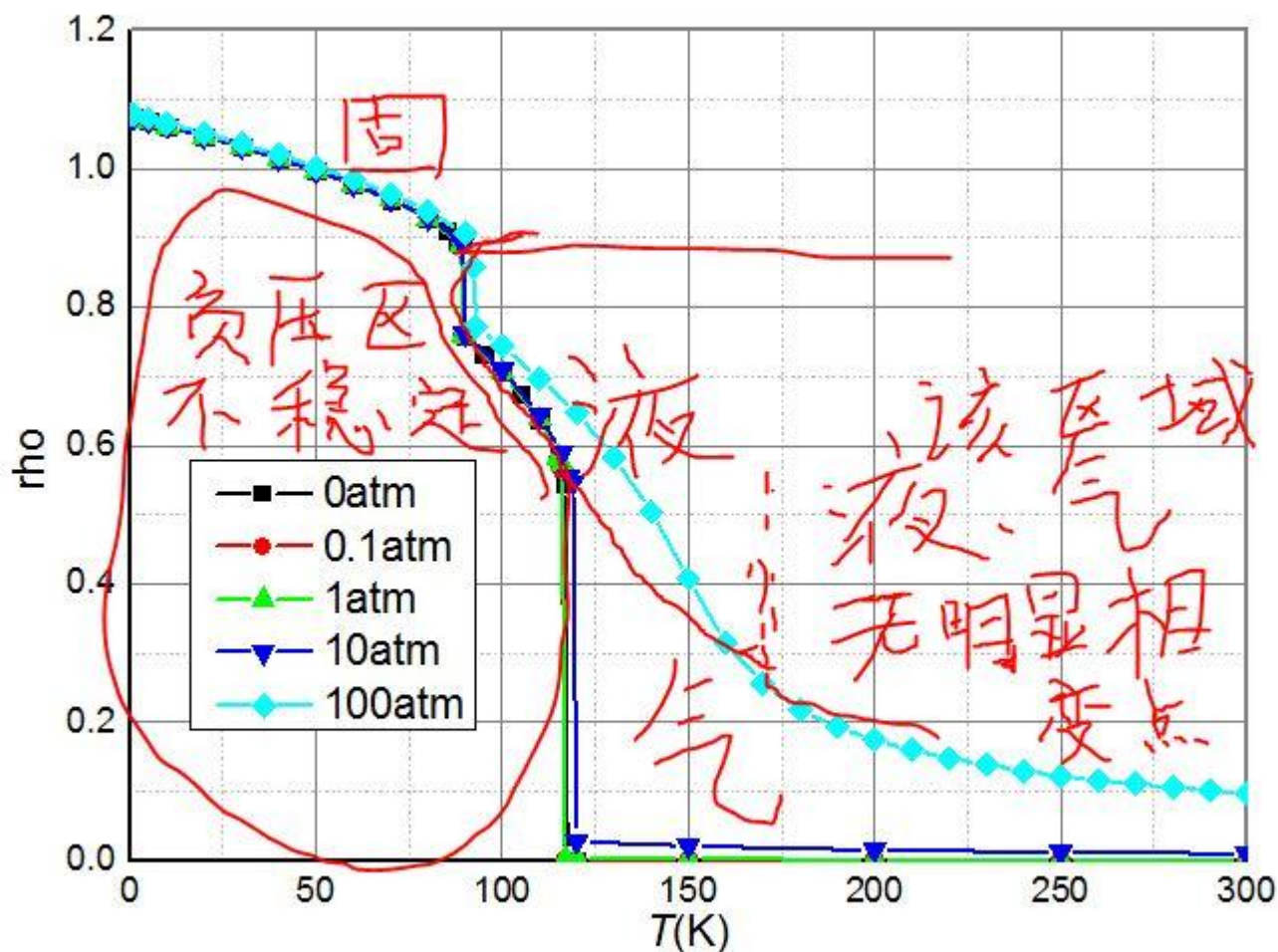
1	80	0.928098122	0.002758958	
1	89	0.890743014	0.003805519	附近可能固液相变
1	89.5	0.760706318	0.003385014	
1	90	0.758178854	0.003837784	
1	100	0.706090417	0.004523265	
1	110	0.639019865	0.005382829	
1	115	0.582928631	0.006767723	
1	116	0.57383619	0.00901109	附近可能液气相变
1	117	0.002526757	4.0204E-05	26000步之后rho才急剧下降
1	120	0.002444905	3.98009E-05	
1	150	0.001943177	2.86611E-05	
1	200	0.00145231	2.42172E-05	
1	250	0.00116164	1.79571E-05	
1	300	0.000966309	1.49373E-05	
10	0	1.0753476	-	零温下结构优化结果
10	1	1.074109956	0.000318935	
10	5	1.068716605	0.000434136	
10	10	1.061929432	0.000503931	
10	20	1.047001057	0.000995597	
10	30	1.031444343	0.00134659	
10	40	1.015068643	0.001362201	
10	50	0.99683029	0.001588123	
10	60	0.977869325	0.001652212	
10	70	0.956369255	0.002319241	
10	80	0.92941187	0.002926629	
10	89	0.89454072	0.00394983	
10	89.5	0.892464293	0.003838224	附近可能固液相变
10	90	0.761187683	0.004033979	
10	100	0.709525709	0.004428416	
10	110	0.643185186	0.006857438	
10	116	0.588916577	0.009452481	
10	118	0.555193241	0.010253223	
10	119	0.546702234	0.009463351	附近可能液气相变
10	120	0.027320057	0.000540484	
10	150	0.020421949	0.000320089	
10	200	0.014779745	0.000242622	
10	250	0.011685219	0.000189423	
10	300	0.009681483	0.00015748	
100	0	1.0786626	-	零温下结构优化结果
100	1	1.077468438	0.00035479	
100	5	1.072482658	0.000504949	
100	10	1.065639089	0.000617587	
100	20	1.051274181	0.000977846	
100	30	1.03614377	0.001012728	
100	40	1.020322078	0.001444511	
100	50	1.002995094	0.001236615	
100	60	0.984384109	0.001987741	

100	70	0.96354682	0.002451216	
100	80	0.939540327	0.002561615	
100	90	0.906476031	0.003284	
100	92.5	0.858080147	0.048812146	
100	93	0.7718173	0.003985757	
100	100	0.743578539	0.003988314	
100	110	0.69670391	0.004752655	
100	120	0.647494505	0.004967716	
100	130	0.583163643	0.00644079	
100	140	0.504136819	0.007636956	
100	150	0.407009936	0.006891024	
100	160	0.314551829	0.007109089	
100	170	0.255917417	0.005971375	已无明显液气相变点
100	180	0.217475052	0.004497788	
100	190	0.192193493	0.003968787	
100	200	0.173829032	0.003106737	
100	210	0.159727436	0.002577913	
100	220	0.147282976	0.002609092	
100	230	0.137998015	0.002197276	
100	240	0.129379065	0.002113386	
100	250	0.122135602	0.001964532	
100	260	0.115805339	0.001951592	
100	270	0.110290318	0.001886398	
100	280	0.105630173	0.001691337	
100	290	0.101242505	0.001720559	
100	300	0.097153027	0.001477846	
.....				
.....				

注：时间有限，表格尚未完成，以后继续完成。先用已有的部分数据作出图象。



在图中粗略标注各区域所处状态，如下图。



显然还需要更多的压强条件下的数据，才能更好地确定各个 ρ 、 T 设置下体系所处状态。

不过从已有的数据点来看，可以发现原始设置 $\rho=0.6$ 的条件下，氩应该主要处于液态，且 120K 以下时处于负压状态，是不稳定的。而 $\rho=0.8$ 或 $\rho=0.85$ 的条件下，可能是固态或液态，还需进一步将上图完善才能判断。

这周先做这么多吧。貌似有点跑题，但个人认为这些工作对以后具体计算热导率有重要参考价值，可以算是先作一下铺垫了。

附录 1 thermostat 方法输入文件（修改后）

```
# sample LAMMPS input script for thermal conductivity of liquid LJ
# thermostatting 2 regions via fix langevin

#有关 Ar 的参数
variable          sigma equal 3.405e-10 #单位: m
variable          epsilon equal 0.0103235761*1.6021765314e-19 #单位:J
variable          m equal 39.948/1000/6.022141510e23      #单位: kg
#单位换算
variable          Kb equal 1.380650524e-23      #SI 制
variable          SI_T equal ${Kb}/${epsilon} #数值关系 T'=T*Kb/epsilon&
=1.380650524e-23/(0.0103235761*1.6021765314e-19)&
=T*8.347246383e-3. (T 单位为 K)。单位: 1.0 对应 119.799986K。
variable          SI_p equal ${sigma}/${epsilon}*${sigma}*${sigma} #数值关系 p'=p*sigma^3/epsilon&
=p*(3.405e-10)^3/(0.0103235761*1.6021765314e-19)&
=p*2.386771368e-8. (p 单位为 Pa, 标准大气压 101325Pa)。&
单位: 1.0 对应 4.189760332e7Pa, 或 413.4971954 标准大气压。
variable          atmos_p equal ${SI_p}*101325      #压强。以大气压为单位时的换算系数。
variable          SI_time equal sqrt(${epsilon}/${sigma}/${sigma}/${m}) #时间。&
数值关系 t'=t*(epsilon/m/sigma^2)^1/2&
=t*(0.0103235761*1.6021765314e-19/(39.948/1000/6.022141510e23)/(3.405e-10)^2)^1/2&
=4.637469925e12t. (t 单位为 s)。单位: 1.0 对应 2.156348216e-13s.
variable          SI_J equal ${sigma}/${epsilon}*${sigma}*sqrt($m)/sqrt(${epsilon})*${sigma}
#单位换算(热流密度)1.511515472e-10
variable          SI_Tz equal ${sigma}/${epsilon}*${Kb} #单位换算(温度梯度)2.842237393e-12
variable          SI_kappa equal ${SI_J}/${SI_Tz} #单位换算(热导率)53.18047941

# settings 需要不断调整的变量

variable          x equal 10 #在运算速度允许的条件下, x 和 y 应该尽量大。以减小温度等统计量的标准差。
variable          y equal 10
variable          z equal 20 #沿 z 方向有温度梯度。
variable          dz equal 1 #高温区、低温区分别所占宽度

variable          a equal 1.882072058 #晶格常数(以 sigma 为单位)。等于 (4/pho) 的立方根。
variable          p equal 1.0*${atmos_p} #压强。含 npt 过程时需设置。
variable          tlo equal 100*${SI_T} #低温。
variable          thi equal 200*${SI_T} #高温。

variable          run_npt equal 0
variable          run_nvt equal 1000
variable          run_langevin1 equal 0
variable          run_langevin2 equal 50000

variable          N_thermo equal 1000

#基本不需要改动的参数
variable          rc equal 2.5
variable          t equal (${tlo}+${thi})/2.0 #平均温度
variable          halfz equal $z/2
variable          rho equal 0.6 #约化原子数密度=4/a^3(1j 单位)

#变量: 随机数 seed
variable          seed_velocity equal 1 #原 87287
variable          seed_lan_hot1 equal 1 #原 59804
variable          seed_lan_cold1 equal 1 #原 287859
variable          seed_lan_hot2 equal 1 #原 59804
variable          seed_lan_cold2 equal 1 #原 287859

# setup problem

units            lj
atom_style       atomic
boundary         p p p

lattice          fcc ${rho}
region           box block 0 $x 0 $y -${halfz} ${halfz} units lattice
create_box       1 box
create_atoms     1 box
mass             1 1.0
velocity         all create $t ${seed_velocity}

#可能需要优化的变量
variable          N_dt equal 50
variable          dt equal 1.0/sqrt(3*${t})/${N_dt} #timestep 值。原默认值 0.005。数值关系 t'=t*(epsilon/m/sigma^2)^1/2&
```

```

= t*(0.0103235761*1.6021765314e-19/(39.948/1000/6.022141510e23)/(3.405e-12)^2)^1/2&
=1466.408305t. (t 单位为 s)。单位: 1.0 对应 6.819383091e-4s.
#注意!! dt 不能太大。由  $1/2*m*v^2=3/2*Kb*T$  估计速度, 取 T=100K, 原子碰撞所需时间  $t=\sigma/v=1.36e-14s$ 。
所以 dt 起码应小于 1.36e-14s。lj 单位下, 最近邻原子距离除以平均速度所得时间:  $(lz/\$z/\sqrt{2})/\sqrt{3*\$t}$ 。
variable      tdamp_nvt equal ${dt}*10 #原 0.5
variable      tdamp_langevin equal ${dt}*3 #原 1.0
variable      tdamp_npt_t equal ${dt}*1
variable      tdamp_npt_p equal ${dt}*10
variable      epsiN equal 1e-30      #加在分母中, 避免除以 0 错误。

timestep      ${dt}

pair_style lj/cut ${rc}
pair_coeff 1 1 1.0 1.0

neighbor       0.3 bin      #暂不优化
neigh_modify   delay 0 every 1 #暂不优化

thermo_style   custom step dt time press lx lz temp
thermo         100

# 0st equilibration run      可选用的等压过程
fix            pl all npt temp $t $t ${tdamp_npt_t} iso $p $p ${tdamp_npt_p}
run            ${run_npt}
unfix          pl
#由气压决定体积
# 1st equilibration run

fix            1 all nvt temp $t $t ${tdamp_nvt}
run            ${run_nvt}
velocity       all scale $t
unfix          1

# heat layers

variable       z2 equal ${dz}*lz/$a/$z
variable       z3 equal -${halfz}*lz/$a/$z
variable       z4 equal (-${halfz}+${dz})*lz/$a/$z
region         hot block INF INF INF INF 0 ${z2}
region         cold block INF INF INF INF ${z3} ${z4}
compute        Thot_lj all temp/region hot
compute        Tcold_lj all temp/region cold
variable       Thot equal c_Thot_lj/${SI_T}
variable       Tcold equal c_Tcold_lj/${SI_T}
variable       tdiff_lj equal c_Thot_lj-c_Tcold_lj
variable       tdiff equal (c_Thot_lj-c_Tcold_lj)/${SI_T}
fix            ave_lj all ave/time 1 ${N_thermo} ${N_thermo} v_tdiff ave running

#获取所需数据: 各层温度。
compute        ke all ke/atom
variable       temp_lj atom c_ke/1.5
variable       temp atom c_ke/1.5/${SI_T}

fix            s1 all ave/spatial 1 ${N_thermo} ${N_thermo} z 0 0.25 v_temp &
               file profile.langevin units lattice

thermo         ${N_thermo}

# 2nd equilibration run

fix            1 all nve
fix            hot all langevin ${thi} ${thi} ${tdamp_langevin} ${seed_lan_hot1} tally yes
fix            cold all langevin ${tlo} ${tlo} ${tdamp_langevin} ${seed_lan_cold1} tally yes
fix_modify     hot temp Thot_lj
fix_modify     cold temp Tcold_lj

thermo_style   custom step dt time press lx lz temp c_Thot_lj c_Tcold_lj v_tdiff_lj f_ave_lj v_Thot v_Tcold v_tdiff f_hot f_cold &
               f_s1[1][3] f_s1[2][3] f_s1[3][3] f_s1[4][3] f_s1[5][3] &
               f_s1[6][3] f_s1[7][3] f_s1[8][3] f_s1[9][3] f_s1[10][3] &
               f_s1[11][3] f_s1[12][3] f_s1[13][3] f_s1[14][3] f_s1[15][3] &
               f_s1[16][3] f_s1[17][3] f_s1[18][3] f_s1[19][3] f_s1[20][3] &
               f_s1[21][3] f_s1[22][3] f_s1[23][3] f_s1[24][3] f_s1[25][3] &
               f_s1[26][3] f_s1[27][3] f_s1[28][3] f_s1[29][3] f_s1[30][3] &
               f_s1[31][3] f_s1[32][3] f_s1[33][3] f_s1[34][3] f_s1[35][3] &
               f_s1[36][3] f_s1[37][3] f_s1[38][3] f_s1[39][3] f_s1[40][3] &
               f_s1[41][3] f_s1[42][3] f_s1[43][3] f_s1[44][3] f_s1[45][3] &
               f_s1[46][3] f_s1[47][3] f_s1[48][3] f_s1[49][3] f_s1[50][3] &
               f_s1[51][3] f_s1[52][3] f_s1[53][3] f_s1[54][3] f_s1[55][3] &

```

```
f_s1[56][3] f_s1[57][3] f_s1[58][3] f_s1[59][3] f_s1[60][3] &  
f_s1[61][3] f_s1[62][3] f_s1[63][3] f_s1[64][3] f_s1[65][3] &  
f_s1[66][3] f_s1[67][3] f_s1[68][3] f_s1[69][3] f_s1[70][3] &  
f_s1[71][3] f_s1[72][3] f_s1[73][3] f_s1[74][3] f_s1[75][3] &  
f_s1[76][3] f_s1[77][3] f_s1[78][3] f_s1[79][3] f_s1[80][3]
```

#从 1 到 80. 即到 z 值/0.25。0.25 是 ave/spatial 中设定的。

```
run                ${run_langevin1}
```

```
# thermal conductivity calculation
```

```
# reset langevin thermostats to zero energy accumulation
```

```
fix                hot all langevin ${thi} ${thi} ${tdamp_langevin} ${seed_lan_hot2} tally yes
```

```
fix                cold all langevin ${tlo} ${tlo} ${tdamp_langevin} ${seed_lan_cold2} tally yes
```

```
fix_modify         hot temp Thot_lj
```

```
fix_modify         cold temp Tcold_lj
```

```
run                ${run_langevin2}
```

附录 2 thermostat 方法输入文件（再次修改后）

```
# sample LAMMPS input script for thermal conductivity of liquid LJ
# thermostatting 2 regions via fix langevin

#有关 Ar 的参数
variable          sigma equal 3.405e-10 #单位: m
variable          epsilon equal 0.0103235761*1.6021765314e-19 #单位:J
variable          m equal 39.948/1000/6.022141510e23 #单位: kg
#单位换算
variable          Kb equal 1.380650524e-23 #SI 制
variable          SI_T equal ${Kb}/${epsilon} #数值关系 T'=T*Kb/epsilon&
=T*1.380650524e-23/(0.0103235761*1.6021765314e-19)&
=T*8.347246383e-3. (T 单位为 K)。单位: 1.0 对应 119.799986K。
variable          SI_p equal ${sigma}/${epsilon}*${sigma}*${sigma} #数值关系 p'=p*sigma^3/epsilon&
=p*(3.405e-10)^3/(0.0103235761*1.6021765314e-19)&
=p*2.386771368e-8. (p 单位为 Pa, 标准大气压 101325Pa)。&
单位: 1.0 对应 4.189760332e7Pa, 或 413.4971954 标准大气压。
variable          atmos_p equal ${SI_p}*101325 #压强。以大气压为单位时的换算系数。
variable          SI_time equal sqrt(${epsilon}/${sigma}/${sigma}/${m}) #时间。&
数值关系 t'=t*(epsilon/m/sigma^2)^1/2&
=t*(0.0103235761*1.6021765314e-19/(39.948/1000/6.022141510e23)/(3.405e-10)^2)^1/2&
==4.637469925e12t. (t 单位为 s)。单位: 1.0 对应 2.156348216e-13s.
variable          SI_J equal ${sigma}/${epsilon}*${sigma}*sqrt(${m})/sqrt(${epsilon})*${sigma}
#单位换算(热流密度)1.511515472e-10
variable          SI_Tz equal ${sigma}/${epsilon}*${Kb} #单位换算(温度梯度)2.842237393e-12
variable          SI_kappa equal ${SI_J}/${SI_Tz} #单位换算(热导率)53.18047941

# settings 需要不断调整的变量

variable          x equal 10 #在运算速度允许的条件下, x 和 y 应该尽量大。以减小温度等统计量的标准差。
variable          y equal 10
variable          z equal 20 #沿 z 方向有温度梯度。
variable          dz equal 1 #高温区、低温区分别所占宽度

variable          a equal 1.882072058 #晶格常数(以 sigma 为单位)。等于 (4/pho) 的立方根。
variable          p equal 1.0*${atmos_p} #压强。含 npt 过程时需设置。
variable          tlo equal 100*${SI_T} #低温。
variable          thi equal 200*${SI_T} #高温。

variable          run_npt equal 0
variable          run_nvt equal 1000
variable          run_langevin1 equal 0
variable          run_langevin2 equal 50000

variable          N_thermo equal 1000

#基本不需要改动的参数
variable          rc equal 2.5
variable          t equal (${tlo}+${thi})/2.0 #平均温度
variable          halfz equal $z/2
variable          rho equal 0.6 #约化原子数密度=4/a^3(lj 单位)

#变量: 随机数 seed
variable          seed_velocity equal 1 #原 87287
variable          seed_lan_hot1 equal 1 #原 59804
variable          seed_lan_cold1 equal 1 #原 287859
variable          seed_lan_hot2 equal 1 #原 59804
variable          seed_lan_cold2 equal 1 #原 287859

# setup problem

units            lj
atom_style       atomic
boundary         p p p

lattice          fcc ${rho}
region           box block 0 $x 0 $y -${halfz} ${halfz} units lattice
create_box       1 box
create_atoms     1 box
mass             1 1.0
velocity         all create $t ${seed_velocity}

#可能需要优化的变量
variable          N_dt equal 50
variable          dt equal 0.005 #timestep 值。原默认值 0.005。数值关系 t'=t*(epsilon/m/sigma^2)^1/2&
=t*(0.0103235761*1.6021765314e-19/(39.948/1000/6.022141510e23)/(3.405e-12)^2)^1/2&
```


=1466.408305t. (t 单位为 s)。单位: 1.0 对应 6.819383091e-4s.

#注意!! dt 不能太大。由 $1/2 * m * v^2 = 3/2 * k_B * T$ 估计速度, 取 T=100K, 原子碰撞所需时间 $t = \sigma / v = 1.36e-14s$ 。&
所以 dt 起码应小于 1.36e-14s. 1j 单位下, 最近邻原子距离除以平均速度所得时间: $(1z / \sqrt{z} / \sqrt{2}) / \sqrt{3 * t}$ 。

```
variable      tdamp_nvt equal ${dt}*10 #原 0.5
variable      tdamp_langevin equal ${dt}*3 #原 1.0
variable      tdamp_npt_t equal ${dt}*1
variable      tdamp_npt_p equal ${dt}*10
variable      epsiN equal 1e-30      #加在分母中, 避免除以 0 错误。

timestep      ${dt}

pair_style lj/cut ${rc}
pair_coeff 1 1 1.0 1.0

neighbor       0.3 bin      #暂不优化
neigh_modify   delay 0 every 1 #暂不优化

thermo_style   custom step dt time press lx lz temp
thermo        100

# 0st equilibration run      可选用的等压过程
fix           pl all npt temp $t $t ${tdamp_npt_t} iso $p $p ${tdamp_npt_p}
run           ${run_npt}
unfix         pl
#由气压决定体积
# 1st equilibration run

fix           1 all nvt temp $t $t ${tdamp_nvt}
run           ${run_nvt}
velocity      all scale $t
unfix        1

# heat layers

variable      z2 equal ${dz}*lz/$a/$z
variable      z3 equal -${halfz}*lz/$a/$z
variable      z4 equal (-${halfz}+${dz})*lz/$a/$z
region        hot block INF INF INF INF 0 ${z2}
region        cold block INF INF INF INF ${z3} ${z4}
compute       Thot_lj all temp/region hot
compute       Tcold_lj all temp/region cold
variable      Thot equal c_Thot_lj/${SI_T}
variable      Tcold equal c_Tcold_lj/${SI_T}
variable      tdiff_lj equal c_Thot_lj-c_Tcold_lj
variable      tdiff equal (c_Thot_lj-c_Tcold_lj)/${SI_T}
fix           ave_lj all ave/time 1 ${N_thermo} ${N_thermo} v_tdiff ave running

#获取所需数据: 各层温度。
compute       ke all ke/atom
variable      temp_lj atom c_ke/1.5
variable      temp atom c_ke/1.5/${SI_T}

fix           s1 all ave/spatial 1 ${N_thermo} ${N_thermo} z 0 0.5 v_temp &
              file profile.langevin units lattice

thermo        ${N_thermo}

# 2nd equilibration run

fix           1 all nve
fix           hot all langevin ${thi} ${thi} ${tdamp_langevin} ${seed_lan_hot1} tally yes
fix           cold all langevin ${tlo} ${tlo} ${tdamp_langevin} ${seed_lan_cold1} tally yes
fix_modify    hot temp Thot_lj
fix_modify    cold temp Tcold_lj

thermo_style   custom step dt time press lx lz temp c_Thot_lj c_Tcold_lj v_tdiff_lj f_ave_lj v_Thot v_Tcold v_tdiff f_hot f_cold &
              f_s1[1][3] f_s1[2][3] f_s1[3][3] f_s1[4][3] f_s1[5][3] &
              f_s1[6][3] f_s1[7][3] f_s1[8][3] f_s1[9][3] f_s1[10][3] &
              f_s1[11][3] f_s1[12][3] f_s1[13][3] f_s1[14][3] f_s1[15][3] &
              f_s1[16][3] f_s1[17][3] f_s1[18][3] f_s1[19][3] f_s1[20][3] &
              f_s1[21][3] f_s1[22][3] f_s1[23][3] f_s1[24][3] f_s1[25][3] &
              f_s1[26][3] f_s1[27][3] f_s1[28][3] f_s1[29][3] f_s1[30][3] &
              f_s1[31][3] f_s1[32][3] f_s1[33][3] f_s1[34][3] f_s1[35][3] &
              f_s1[36][3] f_s1[37][3] f_s1[38][3] f_s1[39][3] f_s1[40][3] #&
              f_s1[41][3] f_s1[42][3] f_s1[43][3] f_s1[44][3] f_s1[45][3] &
              f_s1[46][3] f_s1[47][3] f_s1[48][3] f_s1[49][3] f_s1[50][3] &
              f_s1[51][3] f_s1[52][3] f_s1[53][3] f_s1[54][3] f_s1[55][3] &
              f_s1[56][3] f_s1[57][3] f_s1[58][3] f_s1[59][3] f_s1[60][3] &
```

```
f_s1[61][3] f_s1[62][3] f_s1[63][3] f_s1[64][3] f_s1[65][3] &  
f_s1[66][3] f_s1[67][3] f_s1[68][3] f_s1[69][3] f_s1[70][3] &  
f_s1[71][3] f_s1[72][3] f_s1[73][3] f_s1[74][3] f_s1[75][3] &  
f_s1[76][3] f_s1[77][3] f_s1[78][3] f_s1[79][3] f_s1[80][3]
```

#从 1 到 80. 即到 z 值/0.5。0.5 是 ave/spatial 中设定的。

```
run          ${run_langevin1}
```

```
# thermal conductivity calculation
```

```
# reset langevin thermostats to zero energy accumulation
```

```
fix          hot all langevin ${thi} ${thi} ${tdamp_langevin} ${seed_lan_hot2} tally yes
```

```
fix          cold all langevin ${tlo} ${tlo} ${tdamp_langevin} ${seed_lan_cold2} tally yes
```

```
fix_modify   hot temp Thot_lj
```

```
fix_modify   cold temp Tcold_lj
```

```
run          ${run_langevin2}
```

附录3 greenkubo方法输入文件（修改后）

```
# sample LAMMPS input script for thermal conductivity of liquid LJ
# Green-Kubo method via compute heat/flux and fix ave/correlate
#单位换算
variable          SI_T equal 8.347246383e-3    #数值关系T'=T*Kb/epsilon&
                                     =T*1.380650524e-23/(0.0103235761*1.6021765314e-19)&
                                     =T*8.347246383e-3. (T单位为K)。单位：1.0对应119.799986K。

# settings

variable x equal 10
variable y equal 10
variable z equal 10

variable rho equal 0.6
variable          t equal 100*${SI_T}
variable rc equal 2.5
variable seed equal 1

variable p equal 10000    # correlation length
variable s equal 1        # sample interval
variable d equal $p*$s    # dump interval

# setup problem

units              lj
atom_style          atomic

lattice             fcc ${rho}
region              box block 0 $x 0 $y 0 $z
create_box          1 box
create_atoms        1 box
mass                1 1.0

velocity all create $t ${seed}

pair_style           lj/cut ${rc}
pair_coeff            1 1 1.0 1.0

neighbor 0.3 bin
neigh_modify         delay 0 every 1

# 1st equilibration run

fix                 1 all nvt temp $t $t 0.5
thermo              100
run                 1000
```

```

velocity all scale $t

unfix          1

# thermal conductivity calculation

reset_timestep 0

compute        myKE all ke/atom
compute        myPE all pe/atom
compute        myStress all stress/atom NULL virial
compute        flux all heat/flux myKE myPE myStress
variable        Jx equal c_flux[1]/vol
variable        Jy equal c_flux[2]/vol
variable        Jz equal c_flux[3]/vol

fix            1 all nve
fix            JJ all ave/correlate $s $p $d &
               c_flux[1] c_flux[2] c_flux[3] type auto &
               file heatflux.flux.profile ave running

variable        scale equal $s*dt/$t/$t/vol
variable        k11 equal trap(f_JJ[3])*${scale}
variable        k22 equal trap(f_JJ[4])*${scale}
variable        k33 equal trap(f_JJ[5])*${scale}
variable        kappa equal (trap(f_JJ[3])+trap(f_JJ[4])+trap(f_JJ[5]))*${scale}/3.0

thermo          $d
thermo_style    custom step temp press v_Jx v_Jy v_Jz v_k11 v_k22 v_k33 v_kappa

run            40000

variable        kappa equal (v_k11+v_k22+v_k33)/3.0
print          "running average conductivity: ${kappa}"

```

附录3 greenkubo方法输入文件（修改后）

```
# sample LAMMPS input script for thermal conductivity of liquid LJ
# Green-Kubo method via compute heat/flux and fix ave/correlate
#单位换算
variable          SI_T equal 8.347246383e-3    #数值关系 $T' = T \cdot k_B / \epsilon$ 
                                     = $T \cdot 1.380650524e-23 / (0.0103235761 \cdot 1.6021765314e-19)$  &
                                     = $T \cdot 8.347246383e-3$ . (T单位为K)。单位：1.0对应119.799986K。

# settings

variable x equal 10
variable y equal 10
variable z equal 10

variable rho equal 0.6
variable          t equal 100*${SI_T}
variable rc equal 2.5
variable seed equal 1

variable p equal 10000    # correlation length
variable s equal 1        # sample interval
variable d equal $p*$s    # dump interval

# setup problem

units              lj
atom_style         atomic

lattice            fcc ${rho}
region             box block 0 $x 0 $y 0 $z
create_box         1 box
create_atoms       1 box
mass               1 1.0

velocity all create $t ${seed}

pair_style          lj/cut ${rc}
pair_coeff          1 1 1.0 1.0

neighbor 0.3 bin
neigh_modify        delay 0 every 1

# 1st equilibration run

fix                1 all nvt temp $t $t 0.05
thermo             100
run                10000
```

```

velocity all scale $t

unfix          1

# thermal conductivity calculation

reset_timestep 0

compute        myKE all ke/atom
compute        myPE all pe/atom
compute        myStress all stress/atom NULL virial
compute        flux all heat/flux myKE myPE myStress
variable        Jx equal c_flux[1]/vol
variable        Jy equal c_flux[2]/vol
variable        Jz equal c_flux[3]/vol

fix            1 all nve
fix            JJ all ave/correlate $s $p $d &
               c_flux[1] c_flux[2] c_flux[3] type auto &
               file heatflux.flux.profile ave running

variable        scale equal $s*dt/$t/$t/vol
variable        k11 equal trap(f_JJ[3])*${scale}
variable        k22 equal trap(f_JJ[4])*${scale}
variable        k33 equal trap(f_JJ[5])*${scale}
variable        kappa equal (trap(f_JJ[3])+trap(f_JJ[4])+trap(f_JJ[5]))*${scale}/3.0

thermo          $d
thermo_style    custom step temp press v_Jx v_Jy v_Jz v_k11 v_k22 v_k33 v_kappa

run            100000

variable        kappa equal (v_k11+v_k22+v_k33)/3.0
print           "running average conductivity: ${kappa}"

```