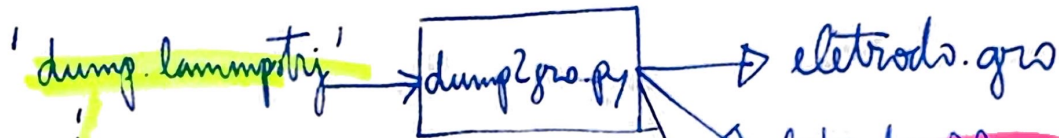


Programa Python

Objetivo . Converter o arquivo de saída do Lammps chamado 'dump.lammpstrj' para .gro, a ser utilizado no Gromacs.



#	At	x	y	z	q
1	Sc	1.71744	40.7468	65.9252	0.10017
...					
5201	T	0	22.5	-73.206	-0.042602
5202	T	1.432	22.5	-73.206	-0.060315

ATOMS		ELETRODO.FF			
traj	@	traj	@	traj	@
T1	C	12.011	-0.0426020	lj	3.5500 0.29288
T2	C	12.011	-0.0603150	lj	3.5500 0.29288

elef. xyz

1664			
elef	eletrods.ff		
T1	0.00000	22.50000	166.99998
T2	1.43200	22.50000	166.99998
...			

Constantes fixadas no '.py'

Aqui o Atomr jé

(2)

fAtool 1 eletrons.xyz -5 $\frac{1000}{\uparrow}$
qualquer n°

~~fAtool~~
packmol < pack.inf

fAtool 1 eletrons.xyz -5 1000 -8
 \uparrow promiss

- Queremos somente o field.top

- Temos o 's12g1.top' com a config. para o
líquido iônico, jz com o campo de força ~~se~~
'???'!

TOP

3

[defaults]

[atomtypes]

• [moleculetype]

{
[atoms]
[bonds]
[angles]
[dihedral]
[exclusions]

• [moleculetype]
{

[System]

[molecules]

s12g1 200

not12 200

electrode 1

Aqui coloca uma linha
opcional de comentários
e os átomos dentro.
Não coloca novamente o
[atomtypes]

colocar o bloco
aqui embaixo, com
o [moleculetype] e todo