

**Научные программы,
реализующие метод
молекулярной динамики.
Программа XMD**

**Научные программы, реализующие
метод молекулярной динамики
(только примеры, а не полный список)**

Коммерческие коды: Materials Explorer

Научные программы:

Для однопроцессорных компьютеров: Dynamo, XMD

Для параллельных расчетов: Paradyn, LAMMPS, IMD

Программа XMD

- Автор: Джон Рифкин (John Rifkin), Университет штата Коннектикут (США)
- <http://xmd.sourceforge.net/about.html>
- Используемые потенциалы: метод погруженного атома для металлов, Стиллингера-Вебера для Si, Терсоффа для C, Si

Синтаксис использования

- Командное окно Windows (можно использовать FAR manager)
- > xmd xmd.in
- **xmd.in** – файл, содержащий команды XMD и вводящий типы и координаты частиц, потенциалы, определяющий условия моделирования и т.д., то есть, составляемый пользователем и управляющий расчетами
- название, расширение командного файла могут быть любыми, например, **ilike.md**, **my.txt** и т.п.

Ввод основных параметров моделирования

- MASS 58.7 (масса атомов в а.е.м.)
- DTIME 5.e-15 (шаг времени в сек)
- EUNIT *uname*, *uname*=erg, joule, K, eV
- READ *filename* (чтение команд с файла)
- READ чаще всего используется для ввода информации, имеющей самостоятельное значение: таблиц с потенциалами, исходных координат и скоростей частиц, например, READ ni.ptf и READ ni.in). Здесь также названия и расширения файлов, с которых считывается информация, могут быть любыми.

Ввод начальных координат и расчетной ячейки

READ coord.in

Файл coord.in содержит следующую информацию:

POSITION 3

1 0.24E-01 0.76E+02 0.88E+00

1 0.52E-01 0.16E+02 0.11E+00

1 0.34E+00 0.76E+01 0.88E+01

тип X Y Z

$0 < X < XBOX$, $0 < Y < YBOX$, $0 < Z < ZBOX$

BOX xbox ybox zbox

Команда POSITION используется для задания координат атомов

BOX используется для задания расчетной ячейки. Ячейка всегда находится в первом октанте системы координат (все координаты положительны)

Таблица потенциалов МПА

eunit eV

potential set eam 1

potential embed 1 500 0.000000 0.250000

0.0000000000000000E+00 -0.505170160489967E+00 -0.793178538482671E+00

-0.102174385870394E+01 -0.121748056902693E+01 -0.139157085043753E+01

.....

potential pair 1 1 499 0.009697 4.838788

0.145411794129883E+06 0.713742661881313E+05 0.466632980925746E+05

.....

potential dens 1 500 0.000000 4.838788

0.0000000000000000E+00 0.590101261981482E-04 0.951200176593089E-03

.....

Параметры, определяющие условия моделирования

ITEMP *temp*

CLAMP *temp [cstep]*

PRESSURE CLAMP bulkmodulus [cstep]

Bulkmodulus in 1 Мбар=0,1 ТПа

PRESSURE EXTERNAL pX [pY pZ]

Режимы моделирования

QUENCH nstep [nquench=1,2]

CMD nstep

repeat 10

cmd 100

quench 200

End

ESAVE nskip file

WRITE FILE [+]filename QUANTITY

QUANTITY=BOX,EATOM,STRESS,PARTICLE

WRITE PDB file