

**КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**ИНСТИТУТ ФИЗИКИ**

**Кафедра вычислительной физики и моделирования физических  
процессов**

**Б.Н. ГАЛИМЗЯНОВ, Г.А. НИКИФОРОВ**

**СБОРНИК ЗАДАЧ ПО КУРСУ  
«КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН МАТЕРИАЛОВ»**

Учебно-методическое пособие

**Казань – 2022**

УДК 538.9; 536.3; 53.03

ББК 22.311

*Принято на заседании учебно-методической комиссии Института физики  
Протокол № 06 от 10 марта 2022 года*

**Рецензенты:**

кандидат физико-математических наук,  
доцент кафедры вычислительной физики КФУ **Р.М. Хуснутдинов**;  
кандидат физико-математических наук,  
доцент кафедры информационных систем КФУ **Ф.М. Гафаров**

**Галимзянов Б.Н.**

**Сборник задач по курсу «Компьютерный дизайн материалов» /**

**Б.Н. Галимзянов, Г.А. Никифоров. – Казань: Казан. ун-т, 2022. – 36 с.**

В данном учебно-методическом пособии представлены задачи по курсу «Компьютерный дизайн материалов». В пособии приводится краткий теоретический материал по основам проведения расчетов в вычислительном пакете Lammps и по визуализации результатов компьютерного моделирования, а также представлены примеры решения типовых задач по моделированию физических процессов. Настоящее пособие предназначено для студентов физических специальностей высших учебных заведений при изучении дисциплин, связанных с компьютерным моделированием.

В учебно-методическом пособии использованы результаты, полученные при выполнении проекта «Теоретические, симуляционные и экспериментальные исследования физико-механических особенностей аморфообразующих систем с неоднородными локальными вязкоупругими свойствами» (№19-12-00022), поддержанного Российским научным фондом.

© Галимзянов Б.Н., 2022

© Казанский университет, 2022

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>Предисловие</b>	4
<b>§1. Особенности работы в вычислительном пакете LAMMPS</b>	5
§1.1 Начальные условия моделирования	8
§1.2 Параметры ячейки моделирования	10
§1.3 Выбор потенциала межчастичного взаимодействия	12
§1.4 Параметры статистического ансамбля	13
§1.5 Выполнение расчетов и сохранение результатов	15
§1.6 Средства визуализации результатов моделирования	18
<b>§2. Решение задач по моделированию физических процессов</b>	23
§2.1 Плавление системы Леннард-Джонса	23
§2.2 Решение задач: моделирование фазовых переходов	24
§2.3 Решение задач: моделирование деформаций	28
<b>Библиографический список</b>	31
<b>Полезные ссылки</b>	32

## Предисловие

В настоящем учебно-методическом пособии представлены задачи по курсу «Компьютерный дизайн материалов». Пособие предназначено для организации самостоятельной и аудиторной работы на практических занятиях. Пособие состоит из двух частей. В первой части приводится краткий теоретический материал с инструкциями и справочной информацией по работе с вычислительным пакетом LAMMPS и программой для визуализации результатов моделирования OVITO. Приводятся примеры решения задач по моделированию методом молекулярной динамики. Для большей наглядности часть информации представлена в виде иллюстраций и таблиц. Также приводятся QR-коды на ссылки с видео инструкциями и литературой, чтобы обучающиеся могли получить оперативный доступ к информации с помощью мобильных телефонов.

Во второй части представлены задачи по проведению молекулярно-динамических расчетов на примере модельной системы Леннард-Джонса. Пособие также содержит задачи на самостоятельную работу. Каждая задача содержит рекомендации и план действий по обработке полученных результатов. В пособии также приводятся литература и полезные ссылки на различные ресурсы по вычислительной физике. В пособии содержатся задачи с различной степенью сложности.

Учебное пособие предназначено для студентов физических специальностей высших учебных заведений при изучении дисциплин, связанных с компьютерным моделированием. Пособие составлено с целью повышения эффективности организации самостоятельной работы и аудиторных занятий студентов очного отделения.

# 1. ОСОБЕННОСТИ РАБОТЫ В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ ПАКЕТЕ

## LAMMPS

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) – это вычислительный пакет по моделированию молекулярной динамики, в основе которого лежат классические уравнения движения. Вычислительный пакет ориентирован на моделирование атомарной или молекулярной динамики различных материалов: металлических, полимерных, биологических, органических и неорганических соединений с различной молекулярной конфигурацией. LAMMPS был разработан для работы на компьютерах, где возможна реализация параллельных вычислений, например, на суперкомпьютерах и вычислительных кластерах. Вычислительный пакет развивается сотрудниками Сандийских национальных лабораторий (Sandia National Laboratories, USA) и свободно распространяется на условиях GNU Public License Version 2 (GPLv2). Информация и ресурсы по LAMMPS доступны на официальном сайте: <https://www.lammps.org>. Основы проведения молекулярно-динамических расчетов с помощью вычислительного пакета LAMMPS также детально обсуждались в работах [1-4].

Вычислительный пакет имеет широкий набор инструментов, методов и алгоритмов по моделированию различного рода физических процессов, в том числе фазовых переходов, транспортных процессов. В настоящем учебно-методическом пособии возможности пакета LAMMPS будут представлены на примере моделирования следующих процессов:

1. Генерация кристаллических и аморфных образцов при определенных термодинамических условиях (температурах, давлениях) на примере металлических сплавов.

2. Моделирование фазовых переходов: процесса плавления кристаллических образцов, процесса аморфизации при быстром охлаждении равновесных жидкостей, процесса кристаллизации аморфных образцов под

действием различного рода механических воздействий (высокие давление, сдвиговая деформация).

Полученные результаты будут обработаны с помощью методов структурного анализа и будут визуализированы с применением программы OVITO [5].

Задачи, представленные в настоящем учебном пособии, будут решаться без проведения параллельных расчетов. Перед началом расчетов следует установить вычислительный пакет на персональный компьютер. Для этого можно воспользоваться видео-инструкцией, перейдя по QR-коду из рисунка 1. Для корректной работы желательно установить последнюю версию вычислительного пакета.



Рис. 1. QR-код, указывающий на ссылку с видео-инструкцией по установке вычислительного пакета LAMMPS (инструкция актуальна на сентябрь 2021 года)

Для запуска расчетов в вычислительном пакете LAMMPS понадобятся следующие файлы, которые можно найти в установочных файлах (см. рисунок 2):

- script-файл (примеры находятся по следующему пути: корневая папка LAMMPS\Examples), файл библиотеки LAMMPS library.meam.
- файл запуска lmp\_serial.exe для однопоточных вычислений.

Для запуска расчетов все необходимые файлы должны находиться в одной папке. Запуск вычислений проводится через командную строку операционной системы Windows. Командную строку можно запустить, набрав *cmd* в строку поиска (находится рядом с кнопкой «Пуск»). Далее в открывшемся окне следует набрать команду *cd* и прописать путь к папке, где располагаются script-файл, lmp\_serial.exe и другие файлы. Команда

cd\lammps\_LJmelt позволяет сменить каталог. Далее необходимо набрать `Imp_serial.exe < in.melt` и нажать кнопку Enter. Пример запуска расчетов с помощью командной строки представлен на рисунке 3.

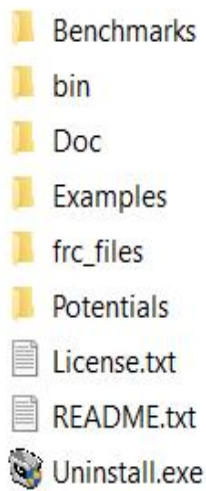


Рис. 2. Файлы и папки, которые доступны после установки пакета LAMMPS на персональный компьютер. Информация актуальна на сентябрь 2021 года

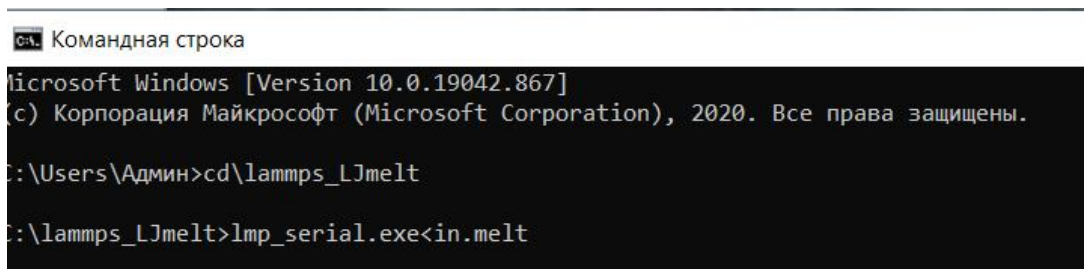
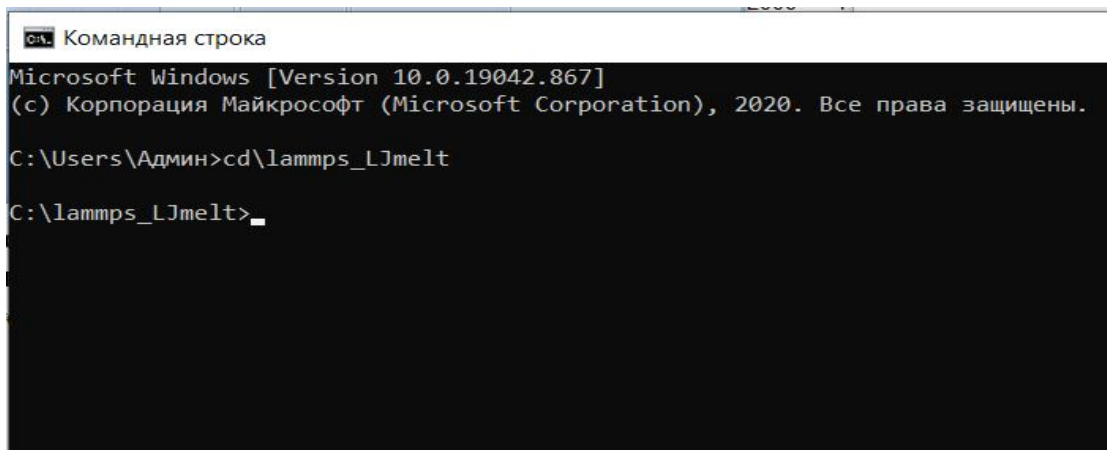


Рис. 3. Пример запуска расчетов с помощью командной строки. Здесь `lammps_LJmelt` – название папки, где располагаются script-файл и `Imp_serial.exe`. `in.melt` – это название script-файла

## 1.1 Начальные условия моделирования

Перед началом молекулярно-динамических расчетов следует корректно задать начальные параметры исследуемой системы. К таким параметрам относятся единицы измерения, потенциал взаимодействия, число атомов, размеры ячейки моделирования, параметры термостата и баростата, временной шаг интегрирования уравнений движения и длительность проведения расчетов [6-11]. Следует иметь в виду, что основная часть этих параметров могут варьироваться или полностью меняться при выполнении расчетов. Например, размеры ячейки моделирования будут меняться при воздействии на исследуемый образец различных механических и термических воздействий (давление, растяжение, кручение, сдвиг, нагревание, охлаждение). Далее разберем ключевые команды пакета LAMMPS, с помощью которых прописываются начальные параметры моделируемой системы и исследуемого процесса.

<code>atom_style stylearg</code>	Здесь <code>stylearg</code> отвечает за тип моделируемых частиц. Например, тип <code>sphere</code> позволяет задавать у частиц массу, радиус и угловую скорость, <code>spin</code> позволяет задать спин частицы. Чаще всего используется тип <code>atomic</code> . Такой тип подходит для моделирования твердых тел и жидкостей, в том числе металлов. Таким образом, финальный код будет записан следующим образом: <code>atom_style atomic</code> .
<code>units style</code>	Команда применяется для обозначения единиц измерения физических величин. Единицы измерения зависят от типа системы. Как правило, в случае модельных систем используются леннард-джонсовские единицы измерения. В случае реальных систем



применяются единицы измерения units real или units metal. В качестве примера внизу приводятся единицы измерения некоторых физических величин, которыми оперирует LAMMPS в случае использования команды units metal:

- масса = г/моль
- расстояние = Å
- время = пс
- энергия = эВ
- скорость = Å/пс
- сила = эВ/Å
- температура = К
- давление = бар
- динамическая вязкость = пуаз
- заряд = e
- плотность = г/см<sup>d</sup>, где d–размерность

Более подробно с особенностями выбора единиц измерения и их параметрами можно ознакомиться, перейдя по ссылке через QR код:



## 1.2 Параметры ячейки моделирования

Ячейка моделирования представляет собой виртуальное пространство, в котором будут находиться атомы рассматриваемой системы на протяжении всего времени расчетов. Для создания ячейки моделирования в первую очередь задаются граничные условия. Существуют два основных типа граничных условий: периодические и зеркальные. Суть периодических граничных условий заключается в том, что основная ячейка моделирования со всех сторон окружена виртуальными копиями этой системы (см. рисунок 4б). Поэтому частицы, расположенные вблизи границы ячейки, взаимодействуют с частицами, расположенными на противоположной стороне этой границы. Например, если следить за движением частиц вдоль оси  $Ox$ , то частицу, покидающую границу, «заместит» другая частица, которая «влетит» с противоположной стороны ячейки. При этом траектория движения и энергия «вылетающей» и «влетающей» частицы будут одинаковы. Как правило, такой тип граничных условий применяется для многочастичных систем, претерпевающих фазовые трансформации. Гораздо реже применяются зеркальные граничные условия, при реализации которых атомы будут испытывать упругие соударения с границей ячейки моделирования (см. рисунок 4а).

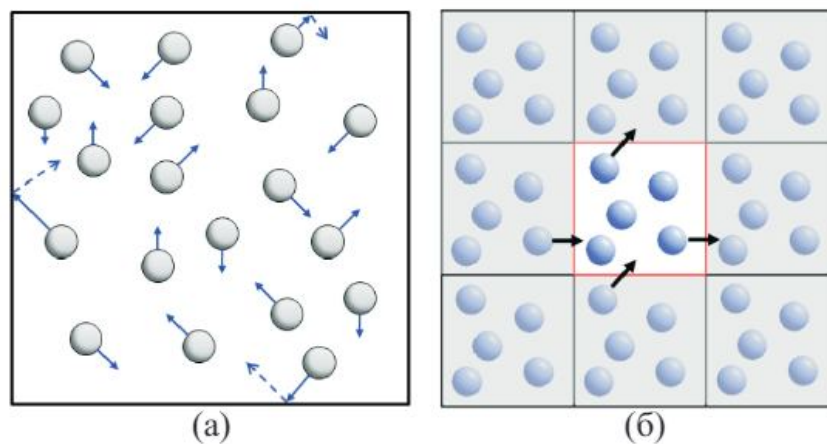


Рис. 4. Пример реализации зеркальных граничных условий (а) и периодических граничных условий (б)

В вычислительном пакете LAMMPS граничные условия задаются с использованием следующих команд:

<pre>boundary xyz</pre>	<p>Здесь x, y и z обозначают направления, вдоль которых задаются граничные условия. На их месте надо написать обозначение типа граничных условий. Периодические граничные условия обозначаются латинской буквой «p» (periodic), а зеркальные – «f» (fixed). Например, в случае ячейки моделирования с периодическими граничными условиями команда будет записана следующим образом: <code>boundary ppp</code>.</p>
<pre>lattice custom d a1 xyz a1 xyz a1 xyz basis x' y' z'</pre>	<p>Эта команда применяется для того, чтоб задать параметры кристаллической решетки и область расположения атомов внутри ячейки моделирования. Команда <code>custom</code> позволяет вручную настроить размер элементарной ячейки. Расстояние между частицами задается через <code>d</code>, базисные векторы ячейки – через коэффициенты <code>x</code>, <code>y</code>, <code>z</code>, а точка отсчета – через команду <code>basis</code>, где <code>x'</code>, <code>y'</code>, <code>z'</code> – приведенные к размерам элементарной ячейки коэффициенты.</p>
<pre>region mybox type 0 n_x 0n_y 0 n_z b_x b_y b_z</pre>	<p>Данная команда применяется для того, чтобы задать размер и тип ячейки моделирования. Например, пункт <code>mybox</code> – название области типа <code>type</code>. Параметры <code>n_x</code>, <code>n_y</code>, <code>n_z</code> отвечают за то, сколько раз будет транслирована частица в соответствующем направлении на величину <math>a(1,2,3) \cdot d</math>. Параметры <code>b_x</code>, <code>b_y</code>, <code>b_z</code> отвечают за наклон ячейки моделирования (например, если задан тип ячейки <code>prizm</code>).</p>

Ниже приведен пример команд для генерации кристаллической решетки на примере системы Леннард-Джонса.

<b>units</b>	lj
<b>atom_style</b>	atomic
<b>boundary</b>	ppp
<b>lattice</b>	fcc 0.8442
<b>region</b>	box block 0 15 0 15 0 15
<b>create_box</b>	1 box
<b>create_atoms</b>	1 box

Следует отметить, что параметры ячейки моделирования сильно зависят от решаемой задачи и условий моделирования. Для того чтобы корректно задать начальные условия, необходимо воспользоваться научной литературой и справочниками.

### **1.3 Выбор потенциала межчастичного взаимодействия**

После того, как задана конфигурация атомов в ячейке моделирования, нужно задать параметры взаимодействия между атомами и указать тип этого взаимодействия. Другими словами, необходимо задать потенциал межчастичного взаимодействия. В настоящее время существует большое разнообразие потенциалов. Выбирать потенциал следует исходя из типа системы и решаемой задачи. Например, в случае инертных газов хорошо подходит потенциал Леннард-Джонса. В случае металлических систем следует выбирать потенциалы семейства EAM и MEAM (метод погруженного атома). При исследовании свойств воды следует брать потенциалы TIP4P, SPC/E или трехчастичный потенциал Стиллинжера-Вебера. Более того, в библиотеке LAMMPS есть готовые потенциалы взаимодействия для различных систем, подготовленные в табличной форме. Современную и пополняемую базу данных с потенциалами взаимодействия можно найти в репозитории потенциалов

(Interatomic Potentials Repository) Национального института стандартов и технологий США, перейдя по ссылке через QR-код:



Чтобы задать потенциал и подгоночные коэффициенты, достаточно сослаться на них через соответствующие команды. При этом файл с значениями энергии межатомного взаимодействия должен находиться в папке вместе с script-файлом. Ниже приведен пример команды для реализации системы с потенциалом взаимодействия Леннард-Джонса:

```
pair_style lj/cut 2.5  
pair_coeff 1 1 1.0 1.0 2.5
```

Здесь команда `pair_style` задает тип потенциала взаимодействия. Значение 2.5 указывает на расстояние обрезания потенциала в леннард-джонсовских единицах. Команда `pair_coeff` задает коэффициенты потенциала. Следует отметить, что содержание параметров этих команд сильно зависит от типа потенциала. Поэтому для корректного определения структуры команд `pair_style` и `pair_coeff` следует воспользоваться мануалом LAMMPS.

## 1.4 Параметры статистического ансамбля

Статистические ансамбли используются для реализации определенного термодинамического состояния систем. В зависимости от условий решаемой

задачи используют различные ансамбли. Например, в микроканоническом NVE-ансамбле постоянным остаются число частиц, объем и энергия системы. Такой ансамбль используют для моделирования изолированных систем в равновесном состоянии. В NVT-ансамбле вместо энергии постоянной является температура системы. Такой ансамбль используется для моделирования процесса энергообмена системы и окружающей среды. В NPT-ансамбле постоянными являются число частиц, давление и температура. Такой ансамбль наиболее приближен к моделированию реальных систем. Как правило, для поддержания постоянства температуры и давления используют термостат и баростат, которые представляют собой определенные алгоритмы. Например, термостат Нозе–Гувера реализуется через введение искусственных координат и скоростей атомов. В результате происходит обмен энергией между системой и тепловым резервуаром. Баростат Нозе-Гувера корректирует давление системы за счет изменения ее объема. Этот вид термостата и баростата хорошо подходит при исследовании фазовых переходов.

В вычислительном пакете LAMMPS реализация NpT-ансамбля осуществляется с помощью fix-команды. Пример записи такой команды выглядит следующим образом:

```
fix 1 all npt temp 300.0 300.0 $(100*dt) iso 1.0 1.0 $(1000*dt)
```

Разберем написанное подробнее. Номер «1» после fix – это ID-номер команды, так как в одном файле может быть задано несколько таких fix-команд. Параметр all – группа атомов (в данном примере выбраны все атомы). Параметры «temp 300.0 300.0 \$(100\*dt)» – включает термостат, температура которого изменяется от первого значения ко второму (в нашем случае она постоянная и измеряется в кельвинах). Здесь параметр dt – временной шаг и значение 100\*dt является стандартным для термостатирования. Параметры «iso 1.0 1.0 \$(1000\*dt)» запускают баростат, который действует на систему изотропно. Значения давления меняются от первого ко второму (в данном

случае давление равно 1 бару). Параметр в скобках имеет точно такое же значение, как и в случае термостата.

Одной из важных команд на начальной стадии расчетов является команда `velocity`. Эта команда задает начальные скорости атомов и их направления движения исходя из заданной температуры. Например, когда система стартует из фазы кристалла, следует использовать эту команду. Пример записи команды с заданными параметрами:

```
velocity all create 300 1 rot yes distgaussian
```

На этом примере параметры `all create 300` задают начальные скорости атомов, соответствующие температуре 300 К. Команда `rot yes` задает момент вращения, в то время как команда `distgaussian` задает гауссовское распределение скоростей. Следует иметь в виду, что команду `velocity` нужно использовать в начальный момент времени моделирования и отключить после достижения системой заданной температуры.

## 1.5 Выполнение расчетов и сохранение результатов

В вычислительном пакете LAMMPS сохранение полученных результатов осуществляется двумя способами. Текущую информацию о состоянии исследуемой системы можно вывести на консольный экран и сохранить в отдельном файле, который, как правило, называется log-файлом. Пример консольного экрана с информацией о системе представлен на рисунке 5. Как правило, на экран выводится информация о начальных параметрах образца, а также список с временным шагом, температурой, давлением и другими параметрами системы.

```
Выбрать Командная строка - Imp_serial.exe
using 1 OpenMP thread(s) per MPI task
Lattice spacing in x,y,z = 1.6796 1.6796 1.6796
Created orthogonal box = (0 0 0) to (25.1939 25.1939 25.1939)
  1 by 1 by 1 MPI processor grid
Created 13500 atoms
  create_atoms CPU = 0.00095874 secs
Neighbor list info ...
  update every 1 steps, delay 10 steps, check yes
  max neighbors/atom: 2000, page size: 100000
  master list distance cutoff = 2.8
  ghost atom cutoff = 2.8
  binsize = 1.4, bins = 18 18 18
  1 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 0 0
  (1) pair lj/cut, perpetual
      attributes: half, newton on
      pair build: half/bin/atomonly/newton
      stencil: half/bin/3d/newton
      bin: standard
Setting up Verlet run ...
Unit style      : lj
Current step    : 0
Time step       : 0.005
Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 9.859 | 9.859 | 9.859 Mbytes
Step Temp PotEng Press
  0          2.5      -6.7733681    -4.1249736
 10      1.325734    -6.0032062     1.1097327
 20      0.87021874  -5.6248563     3.1200927
 30      0.83140338  -5.8352412     1.7751754
 40      0.76389615  -5.9259328     1.7498956
 50      0.75291108  -6.0709558     1.6615488
```

Рис. 5. Пример вывода на консольный экран текущих результатов молекулярно-динамических расчетов

Физические параметры системы и детали моделирования выводятся на консольный экран и записываются в log-файл с помощью специальных команд:

```
thermo_style    custom    step temp pe press density
thermo          10
```

Здесь команда `thermo_style custom` позволяет вывести значения тех параметров, которые нас интересуют. В данном примере – это временной шаг (`step`), температура (`temp`), потенциальная энергия (`pe`), давление (`press`) и плотность (`density`). Команда `thermo` выводит информацию на указанном шаге (в указанном примере шаг равен 10). Более подробно о возможностях команды `thermo_style` можно узнать в мануале вычислительного пакета LAMMPS.

Для вывода информации о каждом атоме, например, для записи координат и скоростей всех атомов в каждый момент времени, необходимо



создать отдельный файл, который (как правило) называется dump-файлом. Для создания этого файла используется команда

```
dump 1 all custom 10 dump_file.txt id type x y z
```

На этом примере номер «1» есть ID-номер команды; команда all – указывает на всю группу атомов; custom позволяет вручную настроить параметры команды dump. Здесь число «10» – шаг, на котором информация об атомах записывается в dump-файл. В данном случае через каждые 10 временных шагов. Адрес dump\_file.txt – название dump-файла, задаваемое пользователем. Следует отметить, что адрес файла может быть любым и указывать в любой каталог. Но при этом в названии адреса нельзя использовать пробелы! В случае рассмотренного примера команда dump записывает в файл ID-номер каждой частицы (id), тип частицы (type) и координаты x, y и z (xyz). Записанная в dump-файл информация необходима, например, для дальнейшей визуализации результатов и для проведения структурного анализа.

Для сохранения текущих настроек и состояния системы с целью продолжения расчетов следует воспользоваться командой restart и создать restart-файл. Пример команды restart выглядит следующим образом:

```
restart 1000 rest_file.equil
```

Здесь значение «1000» – шаг, на котором идет запись информации в restart-файл. Для каждого нового момента времени создается новый restart-файл с названием rest\_file.equil. Формат .equil является стандартным и этот формат не следует менять. В данном примере в restart-файл будут записаны каждые 1000 временных шагов. Следует отметить, что этот файл нужен только для повторного запуска моделирования с определенного состояния системы (или временного шага). Поэтому restart-файл не подходит для анализа физических параметров системы.

Одним из ключевых параметров молекулярно-динамического моделирования является временной шаг. Временной шаг – это время, которое длится один шаг моделирования. Чем меньше временной шаг, тем точнее расчеты, но тем больше времени длится само моделирование. Более подробно об особенностях выбора временного шага можно узнать в учебном пособии [1]. В пакете LAMMPS временной шаг задается командой

**timestep 0.001**

Здесь число 0.001 задает временной шаг в текущих единицах измерения физических величин. Как правило, это время составляет несколько фемтосекунд. Количество всех временных шагов задается командой

**run n**

Здесь n – количество шагов моделирования, которое задается исходя из условий решаемой задачи. Чем больше количество временных шагов, тем больше времени потребуется для проведения расчетов.

## **1.6 Средства визуализации результатов моделирования**

Основным этапом обработки результатов моделирования молекулярной динамики является их визуализация с помощью специальных компьютерных программ. В настоящее время наиболее популярными и подходящими для обработки данных классической молекулярной динамики программами являются VMD и OVITO. Программа VMD (Visual Molecular Dynamics) разработана при участии Университета Иллинойса в Эрбана-Шампейн США и предназначена для визуализации и анализа структуры атомарных и молекулярных систем. Как правило, VMD используется для визуализации биомолекул и полимерных соединений. Программа OVITO, разработанная в

Дармштадтском техническом университете, является более современной и быстрой по сравнению с VMD. В отличие от VMD, программа OVITO ежегодно обновляется и дополняется большим набором инструментов для анализа физико-механических и структурных свойств исследуемой системы. В настоящем учебном пособии мы будем пользоваться программой OVITO. Пример интерфейса программы OVITO представлен на рисунке 6.

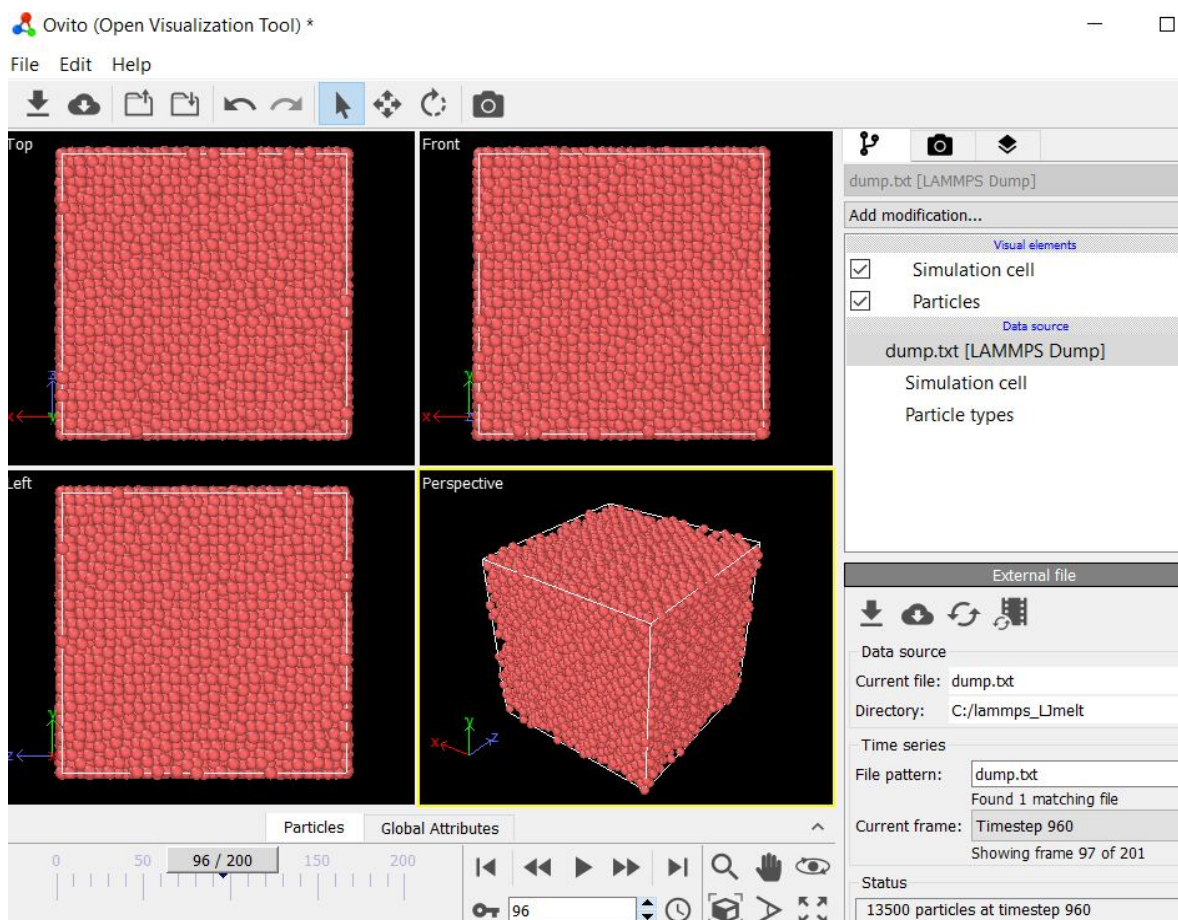


Рис. 6. Интерфейс программы OVITO

Для ознакомления с инструкциями по работе с программой OVITO можно перейти на сайт разработчика, воспользовавшись QR-кодом:



Рассмотрим пример визуализации результатов молекулярно-динамических расчетов с помощью программы OVITO. Для загрузки координат атомов из dump-файла в программу необходимо нажать кнопку Load file и выбрать нужный файл. Также данные в программу можно загрузить «перетаскиванием» dump-фала в окно программы. После загрузки координат программа визуализирует атомы и показывает их в виде шаров. Если в системе несколько типов атомов, то они будут отображаться разными цветами. После загрузки координат становятся доступными модификаторы – это инструменты, с помощью которых можно настраивать особенности отображения атомов и провести анализ свойств системы. Список модификаторов располагается в правом верхнем углу программы и обозначается как «Add modification...». В качестве примера на рисунке 7 представлен стандартный список модификаторов.



Рис. 7. Стандартный список модификаторов программы OVITO

В свою очередь, каждый модификатор имеет свой набор инструментов. В качестве примера на рисунке 8 показаны инструменты модификатора «Common neighbor analysis».

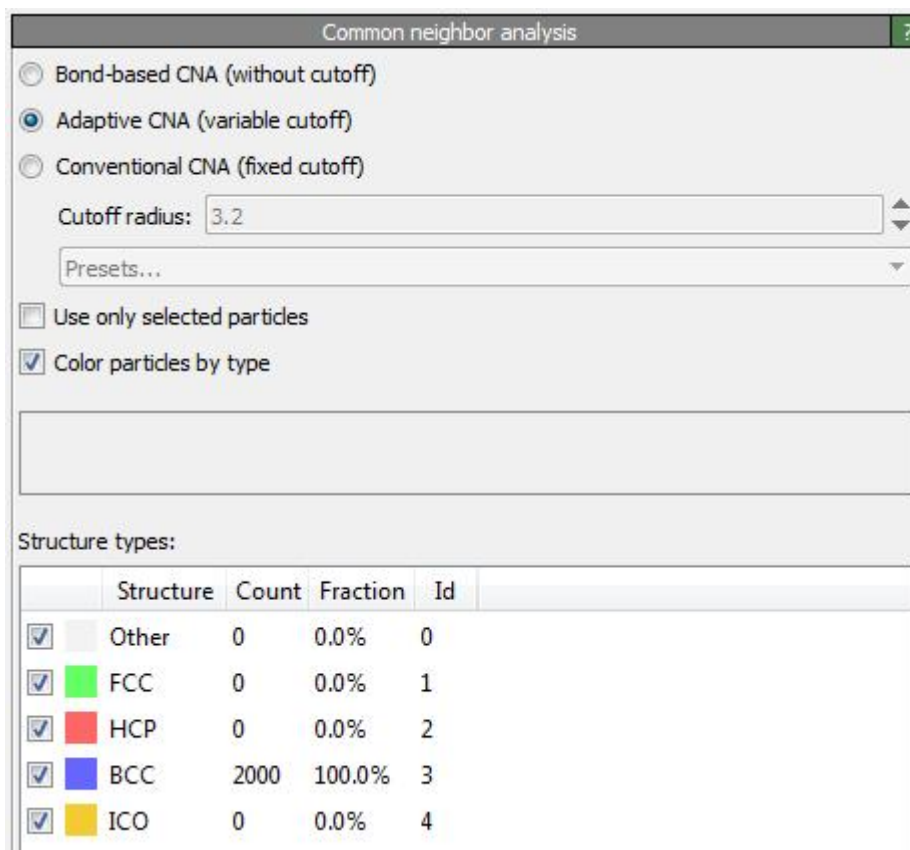


Рис. 8. Инструменты модификатора «Common neighbor analysis»

Следует отметить, что программа OVITO не является полноценным инструментом для научных исследований. Программа лишь помогает дополнить основные результаты научной деятельности. Для проведения более детальных исследований следует воспользоваться другими компьютерными программами или провести комплексные расчеты.

## 2. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

### 2.1 Плавление системы Леннард-Джонса

Для плавления системы Леннард-Джонса следует подготовить script-файл с исходными параметрами системы и деталями расчетов. Ниже приведен образец script-файла, согласно которому нужно создать соответствующий файл с названием in.melt.

```
# 3d Lennard-Jones melt

units          lj
atom_style     atomic

lattice        fcc 0.8442
region         box block 0 15 0 15 0 15
create_box    1 box
create_atoms   1 box

#read_restart rest_file.100000

mass           1 1.0

velocity all create 2.5 87287

pair_style     lj/cut 2.5
pair_coeff     1 1 1.0 1.0 2.5

timestep      0.005

fix 1 all npt temp 0.01 2.5 $(100*dt) iso 2.5 2.5 $(1000*dt)

thermo_style  custom step temp pe press

restart        1000 rest_file.equil

dump          1 all custom 10 dump.txt id type x y z

thermo 10
run           2000
```

Для запуска расчетов можно воспользоваться командой, которая приведена в разделе 1 настоящего учебно-методического пособия. После завершения расчетов будет создан жидкий образец с температурой 2.5 при давлении 2.5 с числом частиц 13500. Длительность моделирования всего 2000

временных шагов. Весь процесс расчетов будет записан в файл с названием dump.txt. Полученный файл следует загрузить в программу OVITO и провести визуализацию процесса плавления.

## 2.2. Решение задач: моделирование фазовых переходов

В таблице приведены задания с деталями расчетов. Используя приведенную информацию, необходимо подготовить script-файл, запустить расчеты в пакете LAMMPS и визуализировать полученные результаты с помощью программы OVITO. При обработке результатов необходимо воспользоваться модификаторами OVITO «Coordination analysis» и «Common neighbor analysis». С помощью первого модификатора необходимо построить функцию радиального распределения частиц и идентифицировать структуру (жидкость, кристалл, нагретый кристалл, аморфное состояние, газ). С помощью второго модификатора необходимо определить тип симметрии кристаллической решетки кристаллических образцов, полученных при кристаллизации аморфных образцов.

Номер задания	Начальные параметры системы и условия проведения расчетов	Задание
1	<p><u>Исходная фаза:</u> кристалл</p> <p><u>Число частиц:</u> 5324</p> <p><u>Ансамбль:</u> NpT</p> <p><u>Температура:</u> стартовая 0.01 lju, конечная 2.5 lju</p> <p><u>Давление:</u> 1.5 lju</p> <p><u>Число шагов:</u> 20000</p> <p><u>Временной шаг:</u> 0.01 lju</p> <p><u>Сохранение файлов:</u></p>	Необходимо получить жидкую фазу системы Леннард-Джонса.



	<p>dump-файл не рассчитывается!!!</p> <p>restart-файл каждые 5000 шагов</p>	
2	<p><u>Исходная фаза: жидкость</u> (запуск с restart-файла)</p> <p><u>Число частиц: 5324</u></p> <p><u>Ансамбль: NpT</u></p> <p><u>Температура: стартовая и</u> <u>конечная 2.5 lju</u></p> <p><u>Давление: 1.5 lju</u></p> <p><u>Число шагов: 10000</u></p> <p><u>Временной шаг: 0.01 lju</u></p> <p><u>Сохранение файлов:</u> <u>dump-файл каждые 10 шагов, x</u> <u>у z</u> <u>restart-файл каждые 5000 шагов</u></p>	<p>Получение равновесной жидкой фазы. Полученные результаты необходимо обработать с помощью программы OVITO.</p>
3	<p><u>Исходная фаза: равновесная жидкость</u> (запуск с restart-файла)</p> <p><u>Число частиц: 5324</u></p> <p><u>Ансамбль: NpT</u></p> <p><u>Температура: стартовая 2.5 lju,</u> <u>конечная 0.5 lju</u></p> <p><u>Давление: 1.5 lju</u></p> <p><u>Число шагов: 10000</u></p> <p><u>Временной шаг: 0.01 lju</u></p> <p><u>Сохранение файлов:</u> <u>dump-файл каждые 10 шагов, x</u> <u>у z</u> <u>restart-файл каждые 5000 шагов</u></p>	<p>Получение аморфной фазы из равновесного жидкого образца. Полученные результаты необходимо обработать с помощью программы OVITO.</p>

4	<p><u>Исходная фаза: аморфная система (запуск с restart-файла)</u></p> <p><u>Число частиц: 5324</u></p> <p><u>Ансамбль: NpT</u></p> <p><u>Температура: стартовая 0.5 lju, конечная 0.5 lju</u></p> <p><u>Давление: 1.5 lju</u></p> <p><u>Число шагов: 5000</u></p> <p><u>Временной шаг: 0.01 lju</u></p> <p><u>Сохранение файлов:</u>  <u>dump-файл каждые 5 шагов, x y z</u>  <u>restart-файл не рассчитывается!!!</u></p>	<p>Квази-стабилизация системы в аморфном состоянии. Полученные результаты необходимо обработать с помощью программы OVITO. Также необходимо выполнить кластерный анализ с помощью модификатора «Common neighbor analysis».</p>
5	<p><u>Исходная фаза: равновесная жидкость (запуск с restart-файла)</u></p> <p><u>Число частиц: 5324</u></p> <p><u>Ансамбль: NpT</u></p> <p><u>Температура: стартовая 2.5 lju, конечная 8.0 lju</u></p> <p><u>Давление: 1.5 lju</u></p> <p><u>Число шагов: 10000</u></p> <p><u>Временной шаг: 0.01 lju</u></p> <p><u>Сохранение файлов:</u>  <u>dump-файл каждые 10 шагов, x y z</u>  <u>restart-файл каждые 5000 шагов</u></p>	<p>Получение фазы газа из жидкости. Полученные результаты необходимо обработать с помощью программы OVITO.</p>
6	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Число частиц: 4608</li> </ul>	<p>Рассчитать радиальную</p>

	<p>(исходная решетка fcc)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Временной шаг: 0.005 lju</li> <li>• Общее число шагов на нагревание: 20000</li> <li>• Общее число шагов на уравнивание системы: 20000</li> <li>• Давление: 3.5 lju</li> <li>• Баростат и термостат со стандартными параметрами</li> <li>• Dump-файл должен содержать 1000 шагов с конфигурацией системы</li> </ul>	<p>функцию распределения частиц для равновесной LJ-жидкости, нагретой до температуры 2.8lju. Выполнить кластерный анализ при плавлении кристаллического образца с помощью программы OVITO.</p>
7	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Временной шаг при охлаждении: 0.005 lju</li> <li>• Временной шаг при кристаллизации аморфной системы: 0.01 lju</li> <li>• Время охлаждения 10000 шагов</li> <li>• Давление: 3.5 lju</li> <li>• Баростат и термостат со стандартными параметрами</li> <li>• Dump-файл должен содержать 1000 шагов с конфигурацией системы</li> </ul>	<p>Выполнить кластерный анализ переохлажденной LJ-системы с температурой 0.5 lju, самопроизвольно кристаллизующейся за 50000 временных шагов. Для получения переохлажденного образца необходимо быстро охладить равновесный жидкий образец, полученный в предыдущей задаче. Для кристаллизации переохлажденного образца необходимо удерживать систему при указанной температуре и при заданном давлении.</p>

## 2.3 Решение задач: моделирование деформаций

В данном разделе представлены задания, направленные на применение различного рода механических воздействий на исследуемые образцы.

Номер задания	Начальные параметры системы и условия проведения расчетов	Задание
1	<p><u>Исходная фаза</u>: жидкость (запуск с restart-файла)</p> <p><u>Число частиц</u>: 5324</p> <p><u>Ансамбль</u>: NpT</p> <p><u>Температура</u>: стартовая и конечная 2.5 lju</p> <p><u>Давление</u>: 1.5 lju</p> <p><u>Число шагов</u>: 30000</p> <p><u>Временной шаг</u>: 0.005 lju</p> <p><u>Скорость деформации</u>: 0.02 lju, 0.05 lju (разные расчеты с разными скоростями)</p> <p><u>Сохранение файлов</u>: dump-файл каждые 30 шагов, x y z restart-файл каждые 10000 шагов</p> <p><b>Обновленный fix для термостата и баростата:</b> fix 1 all npt temp 2.5 2.5 \$(100*dt) y 1.5 1.5 \$(1000*dt) z 1.5 1.5 \$(1000*dt) couple none</p> <p><b>fix для деформации через растяжение</b> fix 2 all deform 1 x erate 0.02 remap x</p>	<p>Растяжение жидкого образца системы Леннард-Джонса вдоль направления X.</p> <p>Полученные результаты необходимо обработать с помощью программы OVITO.</p>




	<p><b>В log-файл необходимо вывести диагональные компоненты тензоры давления!</b></p>	
2	<p>Условия моделирования деформации сохраняются.</p>	<p>Выполнить моделирование процесса растяжения кристаллического образца, нагретого до температуры 0.5.</p>
3	<p><u>Исходная фаза:</u> кристалл, нагретый до температуры 0.5 (запуск с restart-файла)  <u>Число частиц:</u> 5324  <u>Ансамбль:</u> NpT  <u>Температура:</u> стартовая и конечная 0.5 lju  <u>Давление гидростатическое:</u> 7.0  <u>Число шагов:</u> 20000  <u>Временной шаг:</u> 0.005 lju  <u>Скорость деформации:</u> 0.02 lju, 0.05 lju (разные расчеты с разными скоростями)  <u>Сохранение файлов:</u>  dump-файл каждые 20 шагов, x y z  restart-файл каждые 10000 шагов</p> <p><b>Обновленный fix для термостата и баростата:</b>  fix 1 all npt temp 0.5 0.5 \$(100*dt) y 7.0 7.0 \$(1000*dt) z 7.0 7.0 \$(1000*dt) couple</p>	<p>Сжатие нагретого кристалла. Полученные результаты необходимо обработать с помощью программы OVITO.</p>

	<p>none</p> <p><b>fix для деформации через сжатие</b></p> <p>fix 2 all deform 1 x erate -0.02 units box remap x</p> <p><b>В log-файл необходимо вывести диагональные компоненты тензоры давления!</b></p>	
4	<p>Условия моделирования деформации сохраняются.</p>	<p>Выполнить моделирование процесса сжатия равновесной жидкости с температурой 2.5.</p>
5	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Детали моделирования:</li> <li>• Температура: 0.5 lju</li> <li>• Давление гидростатическое: 3.5 lju</li> <li>• Скорость деформации сжатием: 0.01 lju</li> </ul>	<p>Подвергнуть финальный образец из задачи №7 (раздел 2.2) деформации сжатием в течение 40000 временных шагов. Выполнить кластерный анализ полученных результатов.</p>

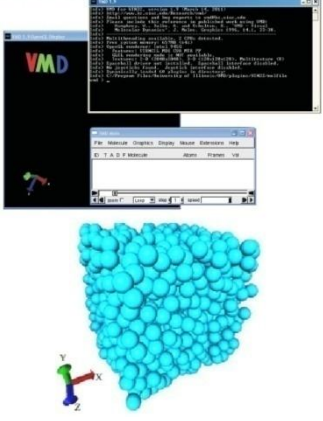
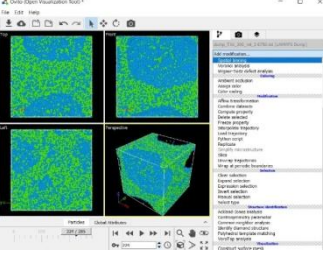
## Библиографический список

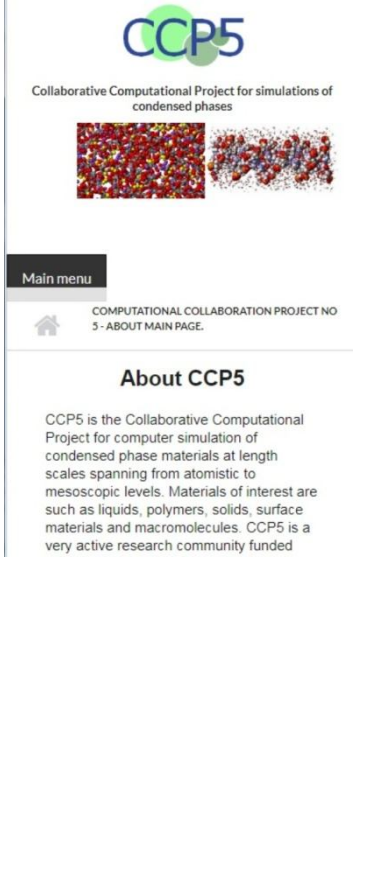
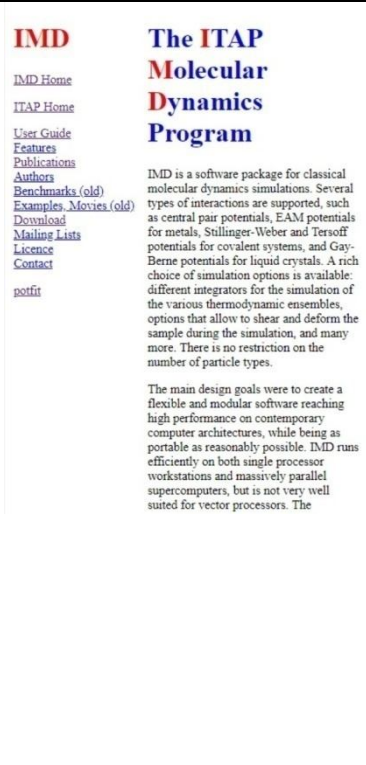
1. Галимзянов, Б.Н. Основы моделирования молекулярной динамики: учебное пособие / А.В. Мокшин, Б.Н. Галимзянов. – М.-Ижевск: Институт компьютерных технологий, 2018. – 106 с.
2. Галимзянов, Б.Н. Молекулярная динамика при структурных трансформациях и фазовых переходах в неупорядоченных системах / Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин. – Казань: Казан. ун-т, 2017. – 159 с.
3. Хуснутдинов, Р.М. Конспект лекций по курсу «Вычислительная физика» (учебно-методическое пособие) / Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин. – Казань: РИЦ Школа, 2021. – 35 с.
4. Хуснутдинов, Р.М. Сборник задач по курсу «Вычислительная физика» (учебно-методическое пособие) / Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин. – Казань: РИЦ Школа, 2021. – 47 с.
5. Stukowski, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool Modelling / A. Stukowski. – Simul. Mater. Sci. Eng. 18. – 2010. – p. 015012.
6. Allen, M.P. Computer Simulation of Liquids / M.P. Allen and D.J. Tildesley. – Oxford: Clarendon Press, 1987. – 404 pp.
7. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике / Х. Гулд, Я. Тобочник. – М.: Мир, 1990. – 350 с.
8. Товбина, Ю.К. Метод молекулярной динамики в физической химии / Под ред. проф. Ю.К. Товбина. – М.: Наука, 1996. – 334 с.
9. Браун, А.Г. Основы статистической физики: Учебное пособие / А.Г. Браун, И.Г. Левитина. – 3-е изд. – М.: НИЦ ИНФРА-М, 2015. – 120 с.
10. Кузнецов, С.И. Молекулярная физика. Термодинамика: учебное пособие / С.И. Кузнецов; Томский политехнический университет. – 2-е изд., перераб. и доп. – Томск: Изд-во ТПУ, 2007. – 126 с.
11. Бахвалов, Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. – Москва: Бином, 2001. – 636 с.

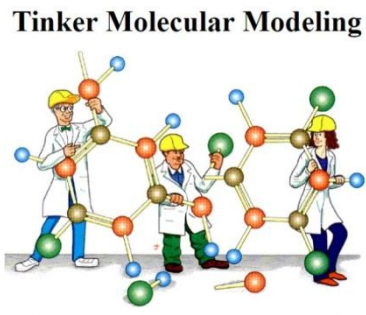

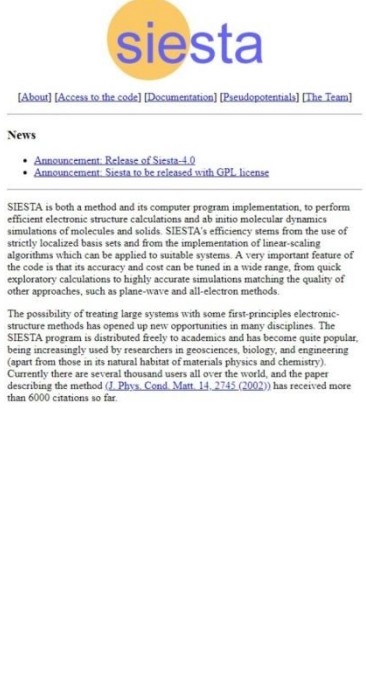
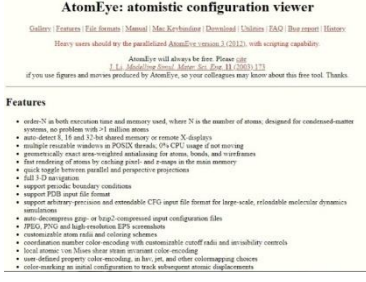
## Полезные ссылки и ресурсы по вычислительной физике

 <p>LAMMPS Molecular Dynamics Simulator</p> <p>help • a device that generates plots, lists of trajectories, solutions, searching files (classes, the help or user) • www.lammps.com</p> <p>Home to simulate • user input</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Big Picture</th> <th>Code</th> <th>Documentation</th> <th>Kernels</th> <th>Kernel Tech</th> <th>Current</th> <th>User Support</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Features</td> <td>Download</td> <td>Manual</td> <td>Publications</td> <td>FAQ/FAQ</td> <td>Authors</td> <td>Mail list</td> </tr> <tr> <td>Links</td> <td>GitHub</td> <td>Articles</td> <td>Package</td> <td>Users' Site</td> <td>History</td> <td>Wiki/Forum</td> </tr> <tr> <td>Platform</td> <td>Source Code</td> <td>Tutorials</td> <td>Modules</td> <td>Using LAMMPS</td> <td>Contributors</td> <td>User Groups</td> </tr> <tr> <td>FAQ</td> <td>Library</td> <td>FAQ</td> <td>Installation</td> <td>Documentation</td> <td>Open Source</td> <td>Contribute to LAMMPS</td> </tr> <tr> <td>Manual Pages</td> <td>API</td> <td>Commands</td> <td>Kernel</td> <td>Kernel</td> <td>Kernel</td> <td>Kernel</td> </tr> <tr> <td>ThinkPad</td> <td>Hardware</td> <td>Software</td> <td>Kernel</td> <td>Kernel</td> <td>Kernel</td> <td>Kernel</td> </tr> </tbody> </table> <p>LAMMPS is a classical molecular dynamics code, and an acronym for Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator.</p> <p>LAMMPS has potentials for solid-state materials (metals, semiconductors) and soft matter (polymers, proteins) and coarse-grained or mesoscopic systems. It can be used to model atoms on atom potentials, as a particle-particle simulator at the atomic, meso, or continuum scale.</p>	Big Picture	Code	Documentation	Kernels	Kernel Tech	Current	User Support	Features	Download	Manual	Publications	FAQ/FAQ	Authors	Mail list	Links	GitHub	Articles	Package	Users' Site	History	Wiki/Forum	Platform	Source Code	Tutorials	Modules	Using LAMMPS	Contributors	User Groups	FAQ	Library	FAQ	Installation	Documentation	Open Source	Contribute to LAMMPS	Manual Pages	API	Commands	Kernel	Kernel	Kernel	Kernel	ThinkPad	Hardware	Software	Kernel	Kernel	Kernel	Kernel	<p><b>LAMMPS</b> — вычислительный пакет по моделированию атомно-молекулярной динамики, разработанный и бесплатно распространяющийся Сандийскими национальными лабораториями (Sandia National Laboratories) Министерства энергетики США. Позволяет проводить крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты, как на отдельных процессорах, так и на нескольких с использованием алгоритмов распараллеливания.</p>
Big Picture	Code	Documentation	Kernels	Kernel Tech	Current	User Support																																												
Features	Download	Manual	Publications	FAQ/FAQ	Authors	Mail list																																												
Links	GitHub	Articles	Package	Users' Site	History	Wiki/Forum																																												
Platform	Source Code	Tutorials	Modules	Using LAMMPS	Contributors	User Groups																																												
FAQ	Library	FAQ	Installation	Documentation	Open Source	Contribute to LAMMPS																																												
Manual Pages	API	Commands	Kernel	Kernel	Kernel	Kernel																																												
ThinkPad	Hardware	Software	Kernel	Kernel	Kernel	Kernel																																												
 <p><b>VASP</b></p> <p><b>About VASP</b> What is the Vienna Ab initio Simulation Package and what can it do?</p> <p><b>Documentation</b> Here you'll find the VASP manual, online as well as a pdf copy. We have also started a Wiki, that in future will replace the online manual completely.</p> <p><b>Vasp Forum</b> Subscribe to the VASP forum and post a question! N.B.: registration is reserved for licensed users!</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>You will have to provide a valid license number.</li> <li>You may only register with an email address clearly attributable to an academic institution or company. We will not accept addresses from gmail, yahoo, etc.</li> </ul>	<p><b>VASP</b> (Vienna Ab initio Simulation Package) — вычислительный пакет по компьютерному моделированию атомарной динамики, основанный на алгоритмах ab-initio (моделирование из первых принципов). Разработка и усовершенствование пакета осуществляется кафедрой теоретической физики VASP Group (Вена, Австрия).</p>																																																	
 <p><b>potfit</b> skip to content</p> <p>potfit wiki</p> <p>open source force-matching</p> <p>Search <input type="text"/> Tools</p> <p><b>Welcome to the potfit wiki</b></p> <p>potfit is a free implementation of the force-matching algorithm to generate effective potentials from ab-initio reference data.</p> <p><b>Features</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Fit empirical potentials for molecular dynamics with the force-matching algorithm</li> <li>Tabulated or analytic potentials are available</li> </ul>	<p><b>Potfit</b> — вычислительный пакет по генерации эффективных потенциалов для межатомарных и межмолекулярных взаимодействий на основе данных первопринципных квантово-химических расчетов. Пакет является достаточно гибким и адаптивным к различным системам, что позволяет осуществлять крупномасштабное моделирование атомарно-молекулярной динамики материалов с физически обоснованными потенциалами. В частности, данный пакет позволяет конструировать эмпирические потенциалы межчастичного взаимодействия</p>																																																	

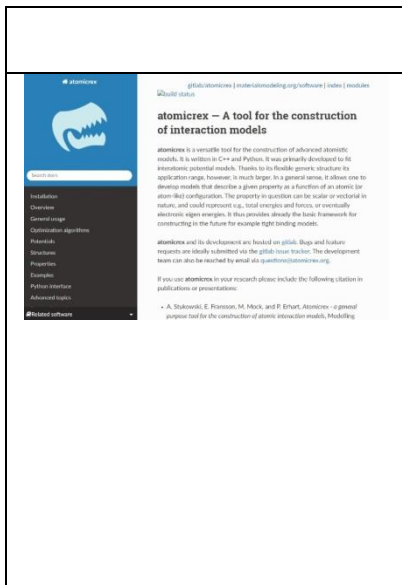


	<p>(например, парные, EAM и MEAM-типа, Стиллинжера-Вебера) с помощью метода силового согласования (force matching method). Подробная информация о вычислительном пакете potfit дается в работе [P. Brommer et al., Mater. Sci. Eng. 23(7), 074002 (2015)]</p>
	<p><b>VMD</b> (Visual Molecular Dynamics) – программа, предназначенная для визуализации и анализа свойств физических, химических, биологических систем. Программа разработана американским университетом штата Иллинойс (University of Illinois at Urbana-Champaign).</p>
	<p><b>OVITO</b> (The Open Visualization Tool) – современное научное программное обеспечение для визуализации и анализа результатов моделирования молекулярной динамики. Программа разработана профессором Александром Стуковски (Дармштадтский технический университет, Германия) и свободно доступна для всех основных платформ по лицензии с исходным кодом. OVITO имеет интуитивно понятный и удобный интерфейс, а также снабжен широким набором инструментов для научных исследований. По сравнению с другими известными средствами визуализации, OVITO отличается высокой скоростью обработки данных.</p>

 <p>Collaborative Computational Project for simulations of condensed phases</p>  <p><b>Main menu</b></p> <p>COMPUTATIONAL COLLABORATION PROJECT NO 5 - ABOUT MAIN PAGE.</p> <p><b>About CCP5</b></p> <p>CCP5 is the Collaborative Computational Project for computer simulation of condensed phase materials at length scales spanning from atomistic to mesoscopic levels. Materials of interest are such as liquids, polymers, solids, surface materials and macromolecules. CCP5 is a very active research community funded</p>	<p><b>CCP5</b> (Collaborative Computational Project) – вычислительные пакеты и программные приложения для компьютерного моделирования материалов на масштабах, простирающихся от атомистических до мезоскопических уровней. CCP5 поддерживает широкий спектр методов моделирования, таких как молекулярная динамика, Monte-Carlo, решетка Boltzmann и динамика диссипативных частиц и т. д. Разработка программного обеспечения осуществляется ведущим мировым исследовательским центром STFC Daresbury Laboratory, специализирующемся на создании и тестировании передовых вычислительных методологий.</p>
<p><b>IMD</b></p> <p><a href="#">IMD Home</a> <a href="#">ITAP Home</a> <a href="#">User Guide</a> <a href="#">Features</a> <a href="#">Publications</a> <a href="#">Authors</a> <a href="#">Benchmarks (old)</a> <a href="#">Examples, Movies (old)</a> <a href="#">Download</a> <a href="#">Mailing Lists</a> <a href="#">Licence</a> <a href="#">Contact</a></p> <p><a href="#">potfit</a></p> <p><b>The ITAP Molecular Dynamics Program</b></p> <p>IMD is a software package for classical molecular dynamics simulations. Several types of interactions are supported, such as central pair potentials, EAM potentials for metals, Stillinger-Weber and Tersoff potentials for covalent systems, and Gay-Berne potentials for liquid crystals. A rich choice of simulation options is available: different integrators for the simulation of the various thermodynamic ensembles, options that allow to shear and deform the sample during the simulation, and many more. There is no restriction on the number of particle types.</p> <p>The main design goals were to create a flexible and modular software reaching high performance on contemporary computer architectures, while being as portable as reasonably possible. IMD runs efficiently on both single processor workstations and massively parallel supercomputers, but is not very well suited for vector processors. The</p>	<p><b>ITAP/IMD</b> – гибкий и модульный программный пакет для моделирования классической молекулярной динамики, поддерживающий несколько типов межчастичных взаимодействий, среди которых простые парные потенциалы для модельных систем, потенциалы EAM-типа для металлов, потенциалы Стиллинджера-Вебера и Терсофа для ковалентных систем. Пакет позволяет выбрать различные варианты моделирования, различные термодинамические ансамбли, моделировать сдвиги и деформации образцов и др. При этом нет ограничений на количество типов частиц.</p>

 <p><b>Tinker Molecular Modeling</b></p>	<p><b>Tinker</b> – программное обеспечение для молекулярного моделирования. В коде Tinker реализована возможность использования силовых полей для биополимеров, таких как Amber (ff94, ff96, ff98, ff99, ff99SB), CHARMM (19, 22, 22 / CMAP), Allinger MM (MM2-1991 и MM3-2000), OPLS (OPLS-UA, OPLS-AA) и другие.</p>
 <p><b>QUANTUMESPRESSO</b> HOME PROJECT DOWNLOAD RESOURCES PSEUDOPO</p> <p>NEWS 10.05.18 THE WALTER KOHN PRIZE Nominations are now being accepted for the second Walter Kohn Prize for quantum-mechanical materials. 30.01.18 QE DEVELOPERS' MEETING 2018 Agenda February 1st 2018</p>	<p><b>Quantum-Espresso</b> – представляет собой интегрированный набор компьютерных программ с открытым исходным кодом для расчетов электронной структуры и моделирования материалов на наномасштабах. Он основан на теории функционала плотности, плоских волнах и псевдопотенциалах.</p>
 <p><b>siesta</b></p> <p>[About] [Access to the code] [Documentation] [Pseudopotentials] [The Team]</p> <p>News</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <a href="#">Announcement: Release of Siesta-4.0</a></li> <li>• <a href="#">Announcement: Siesta to be released with GPL license</a></li> </ul> <p>SIESTA is both a method and its computer program implementation, to perform efficient electronic structure calculations and ab initio molecular dynamics simulations of molecules and solids. SIESTA's efficiency stems from the use of strictly localized basis sets and from the implementation of linear-scaling algorithms which can be applied to suitable systems. A very important feature of the code is that its accuracy and cost can be tuned in a wide range, from quick exploratory calculations to highly accurate simulations matching the quality of other approaches, such as plane-wave and all-electron methods.</p> <p>The possibility of treating large systems with some first-principles electronic-structure methods has opened up new opportunities in many disciplines. The SIESTA program is distributed freely to academics and has become quite popular, being increasingly used by researchers in geosciences, biology, and engineering (apart from those in its natural habitat of materials physics and chemistry). Currently there are several thousand users all over the world, and the paper describing the method (<i>J. Phys. Cond. Matt.</i> 14, 2745 (2002)) has received more than 6000 citations so far.</p>	<p><b>Siesta</b> – это программный комплекс для эффективного расчета электронной структуры и моделирования молекулярной динамики молекул и твердых тел. Эффективность SIESTA связана с использованием строго локализованных базовых наборов и с реализацией алгоритмов линейного масштабирования, которые могут быть применены к любым системам. Программный пакет SIESTA используется исследователями в области биологии и химии, физики конденсированного состояния и материаловедения.</p>
 <p><b>AtomEye: atomistic configuration viewer</b></p> <p>Gallery / Features / File formats / Manual / Mac/Windows/Linux / Utilities / FAQ / Download / History</p> <p>History users should visit the <a href="#">parallelization</a> section (2012), with computing capability.</p> <p>AtomEye will always be free. Please get 1.1.4 <a href="#">AtomEye.html</a>, <a href="#">AtomEye.exe</a>, <a href="#">AtomEye.linux</a> (2013.11)</p> <p>If you use figures and movies generated by AtomEye, so your colleagues may know about this free tool. Thanks.</p> <p><b>Features</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• scales N in both execution time and memory used, where N is the number of atoms, designed for condensed-matter systems, up to problems with 21 million atoms</li> <li>• atom-select (E, H and O) for shared memory or remote X-displays</li> <li>• multiple resizable windows in POSIX threads, 0% CPU usage if not moving</li> <li>• generically exact zero-wrapped wrapping for atoms, bonds, and trajectories</li> <li>• fast rendering of atoms by caching panel and z-wraps in the main memory</li> <li>• quick toggle between parallel and perspective projections</li> <li>• full 3D ray-tracing</li> <li>• support periodic boundary conditions</li> <li>• support PDB input file format</li> <li>• support arbitrary precision and readable CTG input file format for large-scale, reliable molecular dynamics simulations</li> <li>• multi-atomistic grip, or large compressed input configuration files</li> <li>• PBD, PNG and high-resolution EPS screenshots</li> <li>• customizable atom radii and coloring schemes</li> <li>• coordination number color encoding with customizable cutoff radii and invisibility controls</li> <li>• bond angles (or Mueser-style atom-atom color encoding)</li> <li>• user-defined property color encoding, as for jet, and other color-mapping choices</li> <li>• color-mapping an initial configuration to track subsequent atomic displacements</li> </ul>	<p><b>AtomEye</b> – программа, предназначенная для визуализации и анализа данных атомно-молекулярного моделирования. Программа разработана Ju Li – сотрудником отдела материаловедения и инженерии, Университет штата</p>

## Огайо, Колумбус, США.



atomicrex - A tool for the construction of interaction models

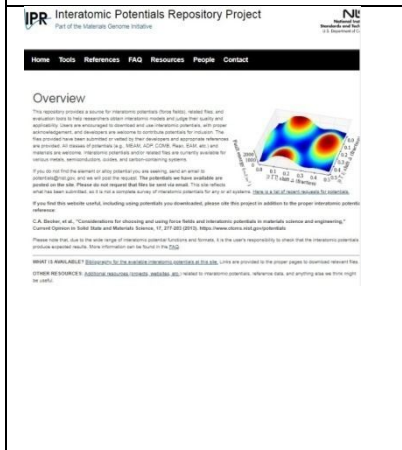
atomicrex is a versatile tool for the construction of advanced atomic models. It is written in C++ and Python. It was primarily developed for all-atomistic potential models. Thanks to its flexible generic structure its application range is broad. It can be used to generate potential energy surfaces for atomic models that describe a given property as a function of an atomic or atom-like configuration. The property in question can be scalar or vectorial in nature, and could represent e.g. total energies and forces, or eventually electronic eigen energies. It thus provides already the basic framework for constructing in the future for example tight-binding models.

atomicrex and its development are hosted on GitHub. Bug and feature requests are ideally submitted via the GitHub issue tracker. The development team can also be reached by email via [quantum@atomicrex.org](mailto:quantum@atomicrex.org).

If you use atomicrex in your research please include the following citation in publications or presentations:

• A. Stoković, E. Rönsson, M. Nock, and P. Erhart, Atomicrex - a general purpose tool for the construction of atomic interaction models, *Modeling*

**Atomicrex** – универсальный инструмент для построения атомистических моделей, написанный на Python и C++. Поддерживается множество оптимизационных алгоритмов с различными критериями сходимости. Разработан коллективом ученых Чалмерского технического университета, Швеция. Доступен на Linux по лицензии с открытым исходным кодом.



Interatomic Potentials Repository Project

Overview

This repository provides a source for interatomic potentials. These include: reduced force, and interaction models for the interatomic potential models and large force fields and a potential energy surface (PES) for use in molecular dynamics, with proper acknowledgment and citation to the authors of the potentials. The repository also provides a source for the construction of interatomic potentials. The repository is organized by element, and contains potentials for various materials, including metals, oxides, and carbon-containing systems.

For a full list of potentials and their authors, visit our website at [www.interatomicpotentials.org](http://www.interatomicpotentials.org) and we will send the request. The potentials we have available are listed on the site. Please do not request that files be sent or copied. The repository will be maintained, and it is not a archive survey of interatomic potentials for any or all systems. [quantum@atomicrex.org](mailto:quantum@atomicrex.org)

If you find this website useful, including using potentials you downloaded, please cite this project in addition to the paper interatomicpotentials.org

C.A. Becker et al., "Contributions for obtaining and using force fields and interatomic potentials in materials science and engineering," *Computational Materials Science*, vol. 171, pp. 1021-1025, 2019.

Please note that, due to the wide range of interatomic potential formats and formats, it is the user's responsibility to check that the interatomic potentials are compatible with the software you are using.

INTERACTIVITY: [www.interatomicpotentials.org](http://www.interatomicpotentials.org) Links are provided to the proper pages to download relevant files. OTHER REPOSITORIES: [www.interatomicpotentials.org](http://www.interatomicpotentials.org) related to interatomic potentials, reference data, and anything else we think might be useful.

**Interatomic Potentials Repository:** Периодически обновляемое хранилище потенциалов межчастичного взаимодействия для неметаллических систем, щелочных металлов, однокомпонентных металлов, бинарных и тернарных сплавов. Хранилище создано при поддержке Национального института стандартов и технологий Министерства торговли США.