Hande Toffoli- LAMMPS ile Moleküler Dinamik Simülasyonları

SORU: Merhabalar, simülasyon hücresi hazırlanan polimer yapının oda sıcaklığındaki yoğunluğunu elde edebilmek için gerekli işlem adımları sırasıyla sizce nasıl olmalıdır. Örneğin Önce Geometri optimizasyonu+NVT+NPT+NVT gibi önerebileceğiniz bir sıralama var mıdır? Yardımcı olursanız sevinirim. İyi çalışmalar.

CEVAP: Polimerler matrislerinin doğru oluşturulması gerçekten de zor bir problemdir. Sizin önerdiğiniz sıra uygun olmakla beraber, polimerin mümkün olduğu kadar çok lokal minimum örneklemesi önemlidir. Dolayısıyla NVT kısmında yüksek bir sıcaklığa getirip bir süre bekletmek ve sonra soğutmak doğru bir yaklaşım olabilir. Buna iyi bir örnek olarak şu referansa bakabilirsiniz:

Sahraei, A. A., Mokarizadeh, A. H., George, D., Rodrigue, D., Baniassadi, M., & Foroutan, M. (2019). Insights into interphase thickness characterization for graphene/epoxy nanocomposites: a molecular dynamics simulation. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *21*(36), 19890-19903.