

ПРОЦЕДУРА ПОДГОТОВКИ ДАННЫХ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР В LAMMPS

Куцова Д.С., Богатиков Е.В., Шебанов Е.Н.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Россия, 394018, г. Воронеж, Университетская площадь, 1, тел.(473)2208-481, e-mail: potanina.ds@gmail.com

Моделирование взаимодействия частиц в системах, содержащих наноструктуры, может быть выполнено в рамках вычислительных экспериментов. Для случаев, в которых химическим взаимодействием можно пренебречь, применяются методы, основанные на классической механике. Одним из них выступает широко известный метод молекулярной динамики. Он позволяет отслеживать временное изменение системы взаимодействующих частиц. Ввиду того, что в основе метода лежит интегрирование уравнений движения, его использование предполагает определение координаты и скорости каждой частицы, входящей в систему, на каждом временном шаге моделирования, а также расчет функции межчастичного потенциального взаимодействия.

В свободно распространяемом открытом пакете LAMMPS, поддерживающем параллельные вычисления, помимо другого функционала, реализованы различные варианты алгоритмов молекулярно-динамических расчетов. За счет многообразия представленных граничных условий и силовых полей, поддержки известных ансамблей моделирования и гибкости задания конфигураций систем частиц, здесь возможно моделирование наноструктур, имеющих сложный состав и структуру. Однако универсальность пакета и отсутствие графического интерфейса в свободном доступе требуют от пользователей тщательной подготовки данных для запуска процедуры моделирования. Такой процесс является довольно трудоемким и требует применения различных вспомогательных программ и утилит. Причем каждая система подготавливается индивидуально с учетом ее особенностей. Тем не менее, общий набор шагов может быть формализован.

В данной работе был описан алгоритм по подготовке данных для проведения моделирования методом молекулярной динамики в пакете LAMMPS на примере системы «силикалит-метан». В такой системе силикалит как синтетический цеолит является наноструктурой с бесконечным алюмосиликатным каркасом, имеющим нейтральный электрический заряд, а метан – простейшим представителем углеводородов, химически инертным. Алгоритм представлен следующими основными шагами: создание входных файлов с описанием состава и геометрии моделируемой системы (типы атомов, связи между ними); подготовка файлов, описывающих сложные потенциалы взаимодействия; разработка управляющего скрипта, включающего в себя настройки и параметры моделирования. На разных этапах использовались скрипты на языке Python, программы Packmol, Mercury, VMD и плагин TopoTools. Описаны особенности использования каждой из них для системы «силикалит-метан» и показана возможность применения алгоритма для схожих систем.