

分子动力学模拟作业

分子动力学 (Molecular Dynamics, MD) 程序是对 LJ 体系进行 NVE 或 NVT 系综下的模拟。理解 MD 程序的输入文件 `md_para.dat` 中的参数的含义。

- 1) pbc 函数的意义
- 2) sample 函数的含义
- 3) scale_T 函数的目的以及意义
- 5) 整个 MD 过程的流程

1. 程序中怎么实现 NVT 模拟?
2. 此程序中更新坐标和速度用的是 velocity Verlet 算法, 请给出此算法下更新坐标和速度的表达式。
3. 从参数文件 `md_para.dat` 中读出每个参数的含义并写出 V 和 T 的值 (针对氦转化为国际单位制)。
4. 此程序有两个输出文件, 各输出了什么物理量? 并用 Excel 画出其时间曲线, 由此观察各物理量在 Berendsen 热浴方法下的变化。
5. 此程序对于体系的初始化是怎么实现的? 粒子的位置, 速度, 加速度的初始值是怎么设置的?
6. 根据求解压强的公式, 自己在 MD 的源程序中加入压强的计算, 并将瞬时压强的采样值输出到 `md_out.dat` 文件中。
7. 用 VMD 软件来观察 `md_out.xyz` 文件, 并比较初态与末态。

附加题: 了解整个 MD 的模拟后, 可以进行多次模拟以获得气体的状态曲线 (P - V 图或 P - ρ 图)。对应于每个固定的温度都会有一条曲线。