

LAMMPS Documentation

**Release 29 Aug 2024**

**The LAMMPS Developers**

[**developers@lammps.org**](mailto:developers@lammps.org)∗

∗ **see** [**https://www.lammps.org/authors.html**](https://www.lammps.org/authors.html) **for details**

**LAMMPS DOCUMENTATION**

**About LAMMPS and this manual** **1**

1. **User Guide** **5**

# Introduction 7

* + 1. Overview of LAMMPS 7

|  |  |
| --- | --- |
| 1.2 | What does a LAMMPS version mean 8 |
| 1.2.1 Identifying the Version 8 |
| 1.2.2 LAMMPS releases, branches, and tags 8 |

* 1. LAMMPS features 9
     1. General features 10
     2. Particle and model types 10
     3. Interatomic potentials (force fields) 11
     4. Atom creation 12
     5. Ensembles, constraints, and boundary conditions 12
     6. Integrators 13
     7. Diagnostics 13
     8. Output 13
     9. Multi-replica models 14
     10. Pre- and post-processing 14
     11. Specialized features 14
  2. LAMMPS non-features 15

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 1.5 LAMMPS portability and compatibility . . . | | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 16 |
|  | 1.5.1 Programming language standards . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 16 |
| 1.5.2 Build systems . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 16 |
| 1.5.3 Operating systems . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 16 |
| 1.5.4 Compilers . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 17 |
| 1.5.5 CPU architectures . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 17 |
| 1.5.6 Portability compliance . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 17 |
| 1.6 LAMMPS open-source license 17 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | 1.6.1 GPL version of LAMMPS . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 17 |
| 1.6.2 LGPL version of LAMMPS . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 18 |
| 1.7 Authors of LAMMPS 18 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 1.8 Citing LAMMPS 19 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | 1.8.1 Core Algorithms . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 19 |
| 1.8.2 DOI for the LAMMPS source code | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 20 |
| 1.8.3 Home page . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 20 |
| 1.8.4 Citing contributions . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 20 |
| 1.9 Additional website links 20 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **2 Install LAMMPS** | | |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | **23** |
|  | 2.1 Download an executable for Linux . . . . . . . . . . . . . | | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 23 |
|  | | 2.1.1 Pre-built static Linux x86\_64 executables . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 24 |
| 2.1.2 Pre-built Ubuntu and Debian Linux executables | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 24 |
| 2.1.3 Pre-built Fedora Linux executables . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 25 |
| 2.1.4 Pre-built EPEL Linux executable . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 25 |
| 2.1.5 Pre-built OpenSuse Linux executable . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 26 |
| 2.1.6 Gentoo Linux executable . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 26 |
| 2.1.7 Archlinux build-script . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 26 |
|  | 2.2 Download an executable for macOS . . . . . . . . . . . . | | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 27 |
| 2.3 Download an executable for Windows . . . . . . . . . . . | | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 27 |
| 2.4 Download an executable for Linux or macOS via Conda . | | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 28 |
| 2.5 Download source and documentation as a tarball . . . . . | | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 29 |
| 2.6 Download the LAMMPS source with git . . . . . . . . . . | | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 29 |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **3 Build LAMMPS** | | |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | **33** |
|  | 3.1 Build LAMMPS with CMake 33 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | | 3.1.1 Advantages of using CMake . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 34 |
| 3.1.2 Getting started . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 34 |
| 3.1.3 Configuration and build options . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 35 |
| 3.1.4 Multi-configuration build systems . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 35 |
| 3.1.5 Installing CMake . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 36 |
|  | 3.2 Build LAMMPS with make 36 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | | 3.2.1 Requirements . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 36 |
| 3.2.2 Getting started . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 37 |
| 3.2.3 Customized builds and alternate makefiles . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 37 |
|  | 3.3 Link LAMMPS as a library to another code 38 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | | 3.3.1 Link with LAMMPS as a static library . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 38 |
| 3.3.2 Link with LAMMPS as a shared library . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 40 |
|  | 3.4 Basic build options 42 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | | 3.4.1 Serial vs parallel build . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 42 |
| 3.4.2 Choice of compiler and compile/link options . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 44 |
| 3.4.3 Build the LAMMPS executable and library . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 46 |
| 3.4.4 Including or removing debug support . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 48 |
| 3.4.5 Build LAMMPS tools . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 48 |
| 3.4.6 Install LAMMPS after a build . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 49 |
|  | 3.5 Optional build settings 50 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | | 3.5.1 C++11 standard compliance . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 50 |
| 3.5.2 FFT library . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 50 |
| 3.5.3 Size of LAMMPS integer types and size limits . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 54 |
| 3.5.4 Output of JPEG, PNG, and movie files . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 55 |
| 3.5.5 Read or write compressed files . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 56 |
| 3.5.6 Support for downloading files . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 56 |
| 3.5.7 Memory allocation alignment . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 57 |
| 3.5.8 Workaround for long long integers . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 58 |
| 3.5.9 Exception handling when using LAMMPS as a library |  | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 58 |
| 3.5.10 Trigger selected floating-point exceptions . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 58 |
|  | 3.6 Include packages in build 59 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | | 3.6.1 Information for both build systems . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 60 |
| 3.6.2 CMake presets for installing many packages . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 61 |
| 3.6.3 Make shortcuts for installing many packages . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 62 |
|  | 3.7 Packages with extra build options 63 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | | 3.7.1 COMPRESS package . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 64 |
| 3.7.2 GPU package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 64 |

|  |  |
| --- | --- |
|  | 3.7.3 KIM package 68 |
| 3.7.4 KOKKOS package 70 |
| 3.7.5 LEPTON package 74 |
| 3.7.6 MACHDYN package 75 |
| 3.7.7 ML-IAP package 75 |
| 3.7.8 OPT package 76 |
| 3.7.9 POEMS package 76 |
| 3.7.10 PYTHON package 77 |
| 3.7.11 VORONOI package 78 |
| 3.7.12 ADIOS package 79 |
| 3.7.13 ATC package 79 |
| 3.7.14 AWPMD package 80 |
| 3.7.15 COLVARS package 81 |
| 3.7.16 ELECTRODE package 82 |
| 3.7.17 ML-PACE package 83 |
| 3.7.18 ML-POD package 84 |
| 3.7.19 ML-QUIP package 85 |
| 3.7.20 PLUMED package 85 |
| 3.7.21 H5MD package 87 |
| 3.7.22 ML-HDNNP package 88 |
| 3.7.23 INTEL package 89 |
| 3.7.24 MDI package 90 |
| 3.7.25 MOLFILE package 90 |
| 3.7.26 NETCDF package 91 |
| 3.7.27 OPENMP package 91 |
| 3.7.28 QMMM package 92 |
| 3.7.29 RHEO package 93 |
| 3.7.30 SCAFACOS package 93 |
| 3.7.31 VTK package 94 |
| 3.8 Build the LAMMPS documentation 95 | |
|  | 3.8.1 Build using GNU make 95 |
| 3.8.2 Build using CMake 96 |
| 3.8.3 Prerequisites for HTML 96 |
| 3.8.4 Prerequisites for PDF 97 |
| 3.8.5 Prerequisites for ePUB and MOBI 97 |
| 3.8.6 Instructions for Developers 97 |
| 3.9 Notes for building LAMMPS on Windows 98 | |
|  | 3.9.1 General remarks 98 |
| 3.9.2 Running Linux on Windows 99 |
| 3.9.3 Using a GNU GCC ported to Windows 99 |
| 3.9.4 Using Microsoft Visual Studio 99 |
| 3.9.5 Using Intel oneAPI Compilers and Libraries 100 |
| 3.9.6 Using a cross-compiler 101 |
| 3.10 Notes for saving disk space when building LAMMPS from source 101 | |
| 3.11 Development build options 102 | |
|  | 3.11.1 Monitor compilation flags (CMake only) 102 |
| 3.11.2 Enable static code analysis with clang-tidy (CMake only) 102 |
| 3.11.3 Report missing and unneeded ‘#include’ statements (CMake only) 102 |
| 3.11.4 Address, Leak, Undefined Behavior, and Thread Sanitizer Support (CMake only) 103 |
| 3.11.5 Code Coverage and Unit Testing (CMake only) 103 |
| 3.11.6 Coding style utilities 111 |
| 3.11.7 Clang-format support 111 |
| 3.11.8 GitHub command line interface 112 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **4** | **Run LAMMPS** | **113** |
|  | 4.1 Basics of running LAMMPS . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 113 |
|  | 4.2 Command-line options . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 114 |
|  | 4.3 Screen and logfile output . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 122 |
|  | 4.4 Running LAMMPS on Windows . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 125 |
| **5** | **Commands** | **127** |
|  | 5.1 LAMMPS input scripts . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 127 |
|  | 5.2 Parsing rules for input scripts . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 128 |
|  | 5.3 Input script structure . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 130 |
|  | 5.3.1 Initialization . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 131 |
|  | 5.3.2 System definition . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 131 |
|  | 5.3.3 Simulation settings . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 131 |
|  | 5.3.4 Run a simulation . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 131 |
|  | 5.4 Commands by category . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 132 |
|  | 5.4.1 Initialization . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 132 |
|  | 5.4.2 Setup simulation box . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 132 |
|  | 5.4.3 Setup atoms . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 132 |
|  | 5.4.4 Force fields . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 132 |
|  | 5.4.5 Settings . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 132 |
|  | 5.4.6 Operations within timestepping (fixes) and diagnostics (computes) . . . . . . . . . . . . | 133 |
|  | 5.4.7 Output . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 133 |
|  | 5.4.8 Actions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 133 |
|  | 5.4.9 Input script control . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 133 |
|  | 5.5 General commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 134 |
|  | 5.6 Fix styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 134 |
|  | 5.7 Compute styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 136 |
|  | 5.8 Pair styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 137 |
|  | 5.9 Bond styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 139 |
|  | 5.10 Angle styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 139 |
|  | 5.11 Dihedral styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 139 |
|  | 5.12 Improper styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 140 |
|  | 5.13 KSpace styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 140 |
|  | 5.14 Dump styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 140 |
|  | 5.15 Removed commands and packages . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 140 |
|  | 5.15.1 restart2data tool . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 141 |
|  | 5.15.2 Fix ave/spatial and fix ave/spatial/sphere . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 141 |
|  | 5.15.3 Box command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 141 |
|  | 5.15.4 Reset\_ids, reset\_atom\_ids, reset\_mol\_ids commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 141 |
|  | 5.15.5 LATTE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 141 |
|  | 5.15.6 MEAM package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 141 |
|  | 5.15.7 Minimize style fire/old . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 142 |
|  | 5.15.8 Pair style mesont/tpm, compute style mesont, atom style mesont . . . . . . . . . . . . . | 142 |
|  | 5.15.9 MPIIO package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 142 |
|  | 5.15.10 MSCG package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 142 |
|  | 5.15.11 REAX package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 142 |
|  | 5.15.12 USER-REAXC package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 142 |
|  | 5.15.13 USER-CUDA package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 143 |
|  | 5.15.14 i-PI tool . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 143 |
|  | 5.15.15 LAMMPS shell . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 143 |

|  |  |
| --- | --- |
| **6** | **Optional packages** **145** |
| 6.1 Available Packages 145 |
| 6.2 Package details 149 |

AMOEBA package 151

6.2.2

ADIOS package 150

6.2.1

* + 1. ASPHERE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 151
    2. ATC package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 152
    3. AWPMD package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 152
    4. BOCS package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 153
    5. BODY package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 153
    6. BPM package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 153
    7. BROWNIAN package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 154
    8. CG-DNA package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 154
    9. CG-SPICA package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 155
    10. CLASS2 package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 155
    11. COLLOID package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 156
    12. COLVARS package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 156
    13. COMPRESS package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 157
    14. CORESHELL package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 157
    15. DIELECTRIC package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 158
    16. DIFFRACTION package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 158
    17. DIPOLE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 159
    18. DPD-BASIC package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 159
    19. DPD-MESO package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 160
    20. DPD-REACT package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 160
    21. DPD-SMOOTH package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 161
    22. DRUDE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 161
    23. EFF package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 162
    24. ELECTRODE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 163
    25. EXTRA-COMMAND package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 163
    26. EXTRA-COMPUTE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 163
    27. EXTRA-DUMP package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 164
    28. EXTRA-FIX package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 164
    29. EXTRA-MOLECULE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 164
    30. EXTRA-PAIR package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 164
    31. FEP package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 165
    32. GPU package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 165
    33. GRANULAR package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 166
    34. H5MD package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 166
    35. INTEL package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 167
    36. INTERLAYER package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 168
    37. KIM package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 168
    38. KOKKOS package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 169
    39. KSPACE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 170
    40. LATBOLTZ package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 170
    41. LEPTON package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 171
    42. MACHDYN package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 171
    43. MANIFOLD package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 172
    44. MANYBODY package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 172
    45. MC package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 173
    46. MDI package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 173
    47. MEAM package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 174
    48. MESONT package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 174
    49. MGPT package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 175
    50. MISC package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 175
    51. ML-HDNNP package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 176
    52. ML-IAP package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 176

6.2.55 ML-PACE package 177

6.2.56 ML-POD package 177

* + 1. ML-QUIP package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 178
    2. ML-RANN package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 178
    3. ML-SNAP package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 179
    4. ML-UF3 package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 179
    5. MOFFF package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 179
    6. MOLECULE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 180
    7. MOLFILE package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 181
    8. NETCDF package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 181
    9. OPENMP package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 182
    10. OPT package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 183
    11. ORIENT package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 183
    12. PERI package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 183
    13. PHONON package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 184
    14. PLUGIN package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 184
    15. PLUMED package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 185
    16. POEMS package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 185
    17. PTM package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 186
    18. PYTHON package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 186
    19. QEQ package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 187
    20. QMMM package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 187
    21. QTB package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 188
    22. REACTION package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 188
    23. REAXFF package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 189
    24. REPLICA package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 189
    25. RHEO package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 190
    26. RIGID package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 190
    27. SCAFACOS package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 191
    28. SHOCK package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 191
    29. SMTBQ package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 192
    30. SPH package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 192
    31. SPIN package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 193
    32. SRD package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 193
    33. TALLY package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 194
    34. UEF package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 194
    35. VORONOI package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 195
    36. VTK package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 195
    37. YAFF package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 196
  1. Benchmarks 197

**197**

**7 Accelerate performance**

* 1. Measuring performance 198
  2. General tips . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 199
  3. Accelerator packages . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 200
     1. GPU package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 201
     2. INTEL package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 204
     3. KOKKOS package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 212
     4. OPENMP package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 219
     5. OPT package . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 222
  4. Comparison of various accelerator packages . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 225

# Howto discussions 227

* 1. General howto 227

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 8.1.1 Restart a simulation . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 227 |
| 8.1.2 Visualize LAMMPS snapshots . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 228 |
| 8.1.3 Run multiple simulations from one input script . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 229 |
| 8.1.4 Multi-replica simulations . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 230 |
| 8.1.5 Library interface to LAMMPS . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 231 |
| 8.1.6 Coupling LAMMPS to other codes . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 231 |
| 8.1.7 Using LAMMPS with the MDI library for code coupling . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 232 |
| 8.1.8 Broken Bonds . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 234 |
| 8.2 | Settings howto . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 235 |
|  | 8.2.1 2d simulations . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 235 |
|  | 8.2.2 Type labels . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 236 |
|  | 8.2.3 Triclinic (non-orthogonal) simulation boxes . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 238 |
|  | 8.2.4 Thermostats . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 243 |
|  | 8.2.5 Barostats . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 244 |
|  | 8.2.6 Walls . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 245 |
|  | 8.2.7 NEMD simulations . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 246 |
|  | 8.2.8 Long-range dispersion settings . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 247 |
| 8.3 | Analysis howto . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 248 |
|  | 8.3.1 Output from LAMMPS (thermo, dumps, computes, fixes, variables) . . . . . . . . . . . | | 248 |
|  | 8.3.2 Use chunks to calculate system properties . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 254 |
|  | 8.3.3 Using distributed grids . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 257 |
|  | 8.3.4 Calculate temperature . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 259 |
|  | 8.3.5 Calculate elastic constants . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 259 |
|  | 8.3.6 Calculate thermal conductivity . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 260 |
|  | 8.3.7 Calculate viscosity . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 261 |
|  | 8.3.8 Calculate diffusion coefficients . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 263 |
|  | 8.3.9 Output structured data from LAMMPS . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 264 |
| 8.4 | Force fields howto . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 270 |
|  | 8.4.1 CHARMM, AMBER, COMPASS, and DREIDING force fields . . . . . . . . . . . . . . | | 270 |
|  | 8.4.2 AMOEBA and HIPPO force fields . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 275 |
|  | 8.4.3 TIP3P water model . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 280 |
|  | 8.4.4 TIP4P water model . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 283 |
|  | 8.4.5 TIP5P water model . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 286 |
|  | 8.4.6 SPC water model . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 288 |
| 8.5 | Packages | howto . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 291 |
|  | 8.5.1 | Finite-size spherical and aspherical particles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 291 |
|  | 8.5.2 | Granular models . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 294 |
|  | 8.5.3 | Body particles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 296 |
|  | 8.5.4 | Bonded particle models . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 302 |
|  | 8.5.5 | Polarizable models . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 304 |
|  | 8.5.6 | Adiabatic core/shell model . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 305 |
|  | 8.5.7 | Drude induced dipoles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 308 |
|  | 8.5.8 | Tutorial for Thermalized Drude oscillators in LAMMPS . . . . . . . . . . . . . . . . . | 309 |
|  | 8.5.9 | Peridynamics with LAMMPS . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 316 |
|  | 8.5.10 | Manifolds (surfaces) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 332 |
|  | 8.5.11 | Reproducing hydrodynamics and elastic objects (RHEO) . . . . . . . . . . . . . . . . . | 333 |
|  | 8.5.12 | Magnetic spins . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 334 |
| 8.6 | Tutorials | howto . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 335 |
|  | 8.6.1 | Using CMake with LAMMPS . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 335 |
|  | 8.6.2 | LAMMPS GitHub tutorial . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 342 |
|  | 8.6.3 | Using LAMMPS-GUI . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 355 |
|  | 8.6.4 | Moltemplate Tutorial . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 369 |
|  | 8.6.5 | PyLammps Tutorial . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 377 |
|  | 8.6.6 | Using LAMMPS on Windows 10 with WSL . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 390 |

# Example scripts 401

* 1. Lowercase directories 401
  2. Uppercase directories 403

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **10 Auxiliary tools** **405** | | |
|  | 10.1 Pre-processing tools 405 | |
| 10.2 Post-processing tools 406 | |
| 10.3 Miscellaneous tools 406 | |
| 10.4 Tool descriptions 406 | |
|  | | 10.4.1 amber2lmp tool 406 |
| 10.4.2 binary2txt tool 406 |
| 10.4.3 ch2lmp tool 407 |
| 10.4.4 chain tool 407 |
| 10.4.5 LAMMPS coding standard 407 |
| 10.4.6 colvars tools 408 |
| 10.4.7 createatoms tool 408 |
| 10.4.8 drude tool 408 |
| 10.4.9 eam database tool 408 |
| 10.4.10 eam generate tool 409 |
| 10.4.11 eff tool 409 |
| 10.4.12 emacs tool 409 |
| 10.4.13 fep tool 409 |
| 10.4.14 i-PI tool 410 |
| 10.4.15 ipp tool 410 |
| 10.4.16 kate tool 410 |
| 10.4.17 LAMMPS-GUI 410 |
| 10.4.18 lmp2arc tool 414 |
| 10.4.19 lmp2cfg tool 414 |
| 10.4.20 Magic patterns for the “file” command 414 |
| 10.4.21 matlab tool 415 |
| 10.4.22 micelle2d tool 415 |
| 10.4.23 moltemplate tool 415 |
| 10.4.24 msi2lmp tool 416 |
| 10.4.25 Scripts for building LAMMPS when offline 416 |
| 10.4.26 phonon tool 417 |
| 10.4.27 polybond tool 418 |
| 10.4.28 pymol\_asphere tool 418 |
| 10.4.29 python tool 418 |
| 10.4.30 Regression tester tool 418 |
| 10.4.31 replica tool 419 |
| 10.4.32 smd tool 419 |
| 10.4.33 spin tool 419 |
| 10.4.34 singularity/apptainer tool 419 |
| 10.4.35 stl\_bin2txt tool 419 |
| 10.4.36 SWIG interface 420 |
| 10.4.37 tabulate tool 421 |
| 10.4.38 tinker tool 422 |
| 10.4.39 valgrind tool 422 |
| 10.4.40 vim tool 422 |
| 10.4.41 xmgrace tool 422 |

# Errors 423

* 1. Common problems 423
  2. Error and warning details 424
     1. Unknown identifier in data file 425
     2. Incorrect format in . . . section of data file 425
  3. Reporting bugs 425
  4. Debugging crashes 426
     1. Using the GDB debugger to get a stack trace 427
     2. Using valgrind to get a stack trace 429
  5. Error messages 430
  6. Warning messages 554

1. **Programmer Guide** **567**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **1 LAMMPS Library Interfaces** **569** | | |
|  | 1.1 LAMMPS C Library API 569 | |
|  | | 1.1.1 Creating or deleting a LAMMPS object 570 |
| 1.1.2 Executing commands 575 |
| 1.1.3 System properties 577 |
| 1.1.4 Per-atom properties 589 |
| 1.1.5 Compute, fixes, variables 590 |
| 1.1.6 Scatter/gather operations 598 |
| 1.1.7 Neighbor list access 612 |
| 1.1.8 Configuration information 614 |
| 1.1.9 Utility functions 621 |
| 1.1.10 Extending the C API 629 |
|  | 1.2 LAMMPS Python APIs 629 | |
| 1.3 LAMMPS Fortran API 630 | |
|  | | 1.3.1 The LIBLAMMPS Fortran Module 630 |
| 1.3.2 Creating or deleting a LAMMPS object 631 |
| 1.3.3 Executing LAMMPS commands 632 |
| 1.3.4 Accessing system properties 632 |
| 1.3.5 The LIBLAMMPS module API 634 |
|  | 1.4 LAMMPS C++ API 678 | |
|  | | 1.4.1 Using the C++ API directly 679 |
| 1.4.2 Creating or deleting a LAMMPS object 679 |
| 1.4.3 Executing LAMMPS commands 680 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **2 Use Python with LAMMPS** **681** | | |
|  | 2.1 Overview 681 | |
| 2.2 Installation 683 | |
|  | | 2.2.1 Installing the LAMMPS Python Module and Shared Library 683 |
| 2.2.2 Extending Python to run in parallel 687 |
|  | 2.3 Run LAMMPS from Python 688 | |
|  | | 2.3.1 Running LAMMPS and Python in serial 688 |
| 2.3.2 Running LAMMPS and Python in parallel with MPI 688 |
| 2.3.3 Running Python scripts 689 |
| 2.3.4 Creating or deleting a LAMMPS object 689 |
| 2.3.5 Executing commands 692 |
| 2.3.6 System properties 694 |
| 2.3.7 Per-atom properties 696 |
| 2.3.8 Compute, fixes, variables 697 |
| 2.3.9 Scatter/gather operations 699 |
| 2.3.10 Neighbor list access 700 |
| 2.3.11 Configuration information 701 |
|  | 2.4 The lammps Python module 702 | |

The PyLammps class API 726

2.4.2

The lammps class API 703

2.4.1

* + 1. The IPyLammps class API . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 732
    2. Additional components of the lammps module . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 733
  1. Extending the Python interface . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 735
  2. Calling Python from LAMMPS . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 735
  3. Output Readers . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 736
  4. Example Python scripts . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 737
  5. Handling LAMMPS errors . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 738
  6. Troubleshooting . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 739
     1. Testing if Python can launch LAMMPS . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 739

# Modifying & extending LAMMPS 741

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 3.1 Overview . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 741 |
| 3.2 Submitting new features for inclusion in LAMMPS . . . . . . . . . . | | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 742 |
|  | 3.2.1 Communication with the LAMMPS developers . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 743 |
| 3.2.2 Time and effort required . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 743 |
| 3.2.3 Submission procedure . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 743 |
| 3.2.4 External contributions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 743 |
| 3.2.5 Location of files: individual files and packages . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 744 |
| 3.2.6 Changes to core LAMMPS files . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 744 |
| 3.3 Requirements for contributions to LAMMPS 744 | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|  | 3.3.1 Motivation . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 744 |
| 3.3.2 Licensing requirements (strict) . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 745 |
| 3.3.3 Integration testing (strict) . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 745 |
| 3.3.4 Documentation (strict) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 745 |
| 3.3.5 Build system (strict) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 747 |
| 3.3.6 Command or style names, file names, and keywords (strict) | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 747 |
| 3.3.7 Programming style requirements (varied) . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 747 |
| 3.3.8 Examples (preferred) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 747 |
| 3.3.9 Error or warning messages and explanations (preferred) . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 748 |
| 3.3.10 Citation reminder (optional) . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 748 |
| 3.3.11 Testing (optional) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | . | 749 |

* 1. LAMMPS programming style 749
     1. Include files (varied) 749
     2. Whitespace (preferred) 750
     3. Constants (strongly preferred) 750
     4. Placement of braces (strongly preferred) 750
     5. Miscellaneous standards (varied) 751
  2. Atom styles 752
  3. Pair styles 754
  4. Bond, angle, dihedral, improper styles 756
  5. Compute styles 757
  6. Fix styles 757
  7. Input script command style 759
  8. Dump styles 759
  9. Kspace styles 760
  10. Minimization styles 760
  11. Region styles 760
  12. Body styles 761
  13. Granular Sub-Model styles 761
  14. Thermodynamic output options 764
  15. Variable options 764

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **4 Information for Developers** | | |  |  |  | **767** |
|  | 4.1 Source files 767 | | | | | |
| 4.2 Class topology 768 | | | | | |
| 4.3 Code design 771 | | | | | |
|  | | 4.3.1 Object-oriented code . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 771 |
| 4.3.2 I/O and output formatting . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 774 |
| 4.3.3 Memory management . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 776 |
|  | 4.4 Parallel algorithms 776 | | | | | |
|  | | 4.4.1 Partitioning . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 777 |
| 4.4.2 Communication . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 778 |
| 4.4.3 Neighbor lists . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 780 |
| 4.4.4 Long-range interactions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 782 |
| 4.4.5 OpenMP Parallelism . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 784 |
|  | 4.5 Accessing per-atom data 785 | | | | | |
|  | | 4.5.1 Owned and ghost atoms . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 786 |
| 4.5.2 Atom indexing . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 786 |
| 4.5.3 Atom class versus AtomVec classes . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 787 |
|  | 4.6 Communication patterns 787 | | | | | |
|  | | 4.6.1 Owned and ghost atoms . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 787 |
| 4.6.2 Higher level communication . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 788 |
|  | 4.7 How a timestep works 790 | | | | | |
| 4.8 Writing new styles 793 | | | | | |
|  | | 4.8.1 Writing new pair styles . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 793 |
| 4.8.2 Package and build system considerations . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 794 |
| 4.8.3 Case 1: a pairwise additive model . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 794 |
| 4.8.4 Case 2: a many-body potential . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 807 |
| 4.8.5 Case 3: a potential requiring communication . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 810 |
| 4.8.6 Case 4: potentials without a compute() function . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 812 |
| 4.8.7 Writing a new fix style . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 813 |
|  | 4.9 Notes for developers and code maintainers 817 | | | | | |
|  | | 4.9.1 Reading and parsing of text and text files . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 818 |
| 4.9.2 Requesting and accessing neighbor lists . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 818 |
| 4.9.3 Choosing between a custom atom style, fix property/atom, and fix STORE/ATOM . | . | . | . | 820 |
| 4.9.4 Fix contributions to instantaneous energy, virial, and cumulative energy . . . . . . | . | . | . | 821 |
| 4.9.5 KSpace PPPM FFT grids . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 822 |
|  | 4.10 Notes for updating code written for older LAMMPS versions 824 | | | | | |
|  | | 4.10.1 Setting flags in the constructor . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 824 |
| 4.10.2 Rename of pack/unpack\_comm() to pack/unpack\_forward\_comm() . . . . . . . . . | . | . | . | 825 |
| 4.10.3 Use ev\_init() to initialize variables derived from eflag and vflag . . . . . . . . . . | . | . | . | 825 |
| 4.10.4 Use utils::count\_words() functions instead of atom->count\_words() . . . . . . . . | . | . | . | 826 |
| 4.10.5 Use utils::numeric() functions instead of force->numeric() . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 826 |
| 4.10.6 Use utils::open\_potential() function to open potential files . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 827 |
| 4.10.7 Use symbolic Atom and AtomVec constants instead of numerical values . . . . . . | . | . | . | 827 |
| 4.10.8 Simplify customized error messages . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 828 |
| 4.10.9 Use of “override” instead of “virtual” . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 828 |
| 4.10.10 Simplified function names for forward and reverse communication . . . . . . . . . | . | . | . | 829 |
| 4.10.11 Simplified and more compact neighbor list requests . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 829 |
| 4.10.12 Split of fix STORE into fix STORE/GLOBAL and fix STORE/PERATOM . . . . . | . | . | . | 830 |
| 4.10.13 Rename of fix STORE/PERATOM to fix STORE/ATOM and change of arguments | . | . | . | 831 |
| 4.10.14 Use Output::get\_dump\_by\_id() instead of Output::find\_dump() . . . . . . . . . . . | . | . | . | 831 |
| 4.10.15 Refactored grid communication using Grid3d/Grid2d classes instead of GridComm . . . 832 | | | | |
|  | 4.11 Writing plugins 833 | | | | | |
|  | | 4.11.1 Members of lammpsplugin\_t . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 833 |
| 4.11.2 Pair style example . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | . | . | . | 834 |

|  |  |
| --- | --- |
|  | 4.11.3 Fix style example 834 |
| 4.11.4 Command style example 835 |
| 4.11.5 Additional Details 836 |
| 4.11.6 Compiling plugins 837 |
| 4.12 Adding tests for unit testing 837 | |
|  | 4.12.1 Tests for utility functions 838 |
| 4.12.2 Tests for individual LAMMPS commands 839 |
| 4.12.3 Tests for the C-style library interface 840 |
| 4.12.4 Tests for the Python module and package 840 |
| 4.12.5 Tests for the Fortran interface 841 |
| 4.12.6 Tests for the C++-style library interface 841 |
| 4.12.7 Tests for reading and writing file formats 841 |
| 4.12.8 Tests for styles computing or modifying forces 841 |
| 4.12.9 Tests for programs in the tools folder 844 |
| 4.12.10 Troubleshooting failed unit tests 844 |
| 4.13 C++ base classes 845 | |
|  | 4.13.1 LAMMPS Class 846 |
| 4.13.2 LAMMPS Atom and AtomVec Base Classes 848 |
| 4.13.3 LAMMPS Input Base Class 851 |
| 4.14 Platform abstraction functions 853 | |
|  | 4.14.1 Time functions 853 |
| 4.14.2 Platform information functions 853 |
| 4.14.3 File and path functions and global constants 854 |
| 4.14.4 Standard I/O function wrappers 857 |
| 4.14.5 Environment variable functions 858 |
| 4.14.6 Dynamically loaded object or library functions 859 |
| 4.14.7 Compressed file I/O functions 860 |
| 4.15 Utility functions 860 | |
|  | 4.15.1 I/O with status check and similar functions 860 |
| 4.15.2 String to number conversions with validity check 862 |
| 4.15.3 String processing 865 |
| 4.15.4 Potential file functions 870 |
| 4.15.5 Argument processing 871 |
| 4.15.6 Convenience functions 873 |
| 4.15.7 Customized standard functions 875 |
| 4.16 Special Math functions 876 | |
| 4.17 Tokenizer classes 878 | |
| 4.18 Argument parsing classes 883 | |
| 4.19 File reader classes 886 | |
| 4.20 Memory pool classes 891 | |
| 4.21 Eigensolver functions 894 | |
| 4.22 Communication buffer coding with *ubuf* 895 | |
| 4.23 Use of distributed grids within style classes 896 | |
|  | 4.23.1 Style commands 897 |
| 4.23.2 Grid data allocation and access 897 |
| 4.23.3 Grid class constructors 898 |
| 4.23.4 Grid class set methods 899 |
| 4.23.5 Grid class setup\_grid method 900 |
| 4.23.6 More grid class set methods 900 |
| 4.23.7 Grid class get methods 901 |
| 4.23.8 Grid class owned/ghost communication 901 |
| 4.23.9 Grid class remap methods for load balancing 903 |
| 4.23.10 Grid class I/O methods 904 |
| 4.23.11 Style class grid access methods 905 |

1. **Command Reference** **909**

4.23.12 Final notes 906

# Commands 911

* + 1. angle\_coeff command 911
       1. Syntax 911
       2. Examples 911
       3. Description 911
       4. Restrictions 912
       5. Related commands 912
       6. Default 912
    2. angle\_style command 912
       1. Syntax 912
       2. Examples 913
       3. Description 913
       4. Restrictions 914
       5. Related commands 914
       6. Default 914
    3. angle\_write command 915
       1. Syntax 915
       2. Examples 915
       3. Description 915
       4. Restrictions 915
       5. Related commands 916
       6. Default 916
    4. atom\_modify command 916
       1. Syntax 916
       2. Examples 916
       3. Description 917
       4. Restrictions 918
       5. Related commands 918
       6. Default 919
    5. atom\_style command 919
       1. Syntax 919
       2. Examples 919
       3. Description 920
       4. Atom style attributes 920
       5. Particle size and mass 922
       6. Additional information about specific atom styles 922
       7. Restrictions 925
       8. Related commands 925
       9. Default 925
    6. balance command 925
       1. Syntax 925
       2. Examples 926
       3. Description 926
       4. Restrictions 932
       5. Related commands 932
       6. Default 932
    7. bond\_coeff command 933
       1. Syntax 933
       2. Examples 933
       3. Description 933
       4. Restrictions 934
       5. Related commands 934
       6. Default 934
    8. bond\_style command 934
       1. Syntax 934
       2. Examples 934
       3. Description 934
       4. Restrictions 936
       5. Related commands 936
       6. Default 936
    9. bond\_write command 936
       1. Syntax 936
       2. Examples 937
       3. Description 937
       4. Restrictions 937
       5. Related commands 937
       6. Default 937
    10. boundary command 937
        1. Syntax 937
        2. Examples 938
        3. Description 938
        4. Restrictions 939
        5. Related commands 939
        6. Default 939
    11. change\_box command 939
        1. Syntax 939
        2. Examples 940
        3. Description 940
        4. Restrictions 944
        5. Related commands 944
        6. Default 944
    12. clear command 944
        1. Syntax 944
        2. Examples 944
        3. Description 945
        4. Restrictions 945
        5. Related commands 945
        6. Default 945
    13. comm\_modify command 945
        1. Syntax 945
        2. Examples 946
        3. Description 946
        4. Restrictions 948
        5. Related commands 948
        6. Default 948
    14. comm\_style command 948
        1. Syntax 948
        2. Examples 948
        3. Description 948
        4. Restrictions 949
        5. Related commands 949
        6. Default 949
    15. compute command 949

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 1.15.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 949 |
| 1.15.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 949 |
| 1.15.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 949 |
| 1.15.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 956 |
| 1.15.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 956 |
| 1.15.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 956 |
| 1.16 | compute\_modify command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 956 |
|  | 1.16.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 956 |
|  | 1.16.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 957 |
|  | 1.16.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 957 |
|  | 1.16.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 957 |
|  | 1.16.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 957 |
|  | 1.16.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 957 |
| 1.17 | create\_atoms command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 958 |
|  | 1.17.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 958 |
|  | 1.17.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 959 |
|  | 1.17.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 959 |
|  | 1.17.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 966 |
|  | 1.17.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 966 |
|  | 1.17.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 966 |
| 1.18 | create\_bonds command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 966 |
|  | 1.18.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 966 |
|  | 1.18.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 967 |
|  | 1.18.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 967 |
|  | 1.18.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 969 |
|  | 1.18.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 969 |
|  | 1.18.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 969 |
| 1.19 | create\_box command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 969 |
|  | 1.19.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 969 |
|  | 1.19.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 970 |
|  | 1.19.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 970 |
|  | 1.19.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 972 |
|  | 1.19.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 972 |
|  | 1.19.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 972 |
| 1.20 | delete\_atoms command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 973 |
|  | 1.20.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 973 |
|  | 1.20.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 973 |
|  | 1.20.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 974 |
|  | 1.20.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 975 |
|  | 1.20.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 975 |
|  | 1.20.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 975 |
| 1.21 | delete\_bonds command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 975 |
|  | 1.21.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 975 |
|  | 1.21.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 976 |
|  | 1.21.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 976 |
|  | 1.21.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 977 |
|  | 1.21.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 978 |
|  | 1.21.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 978 |
| 1.22 | dielectric command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 978 |
|  | 1.22.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 978 |
|  | 1.22.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 978 |
|  | 1.22.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 978 |
|  | 1.22.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 978 |
|  | 1.22.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 978 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 1.22.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 978 |
| 1.23 | dihedral\_coeff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 979 |
|  | 1.23.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 979 |
|  | 1.23.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 979 |
|  | 1.23.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 979 |
|  | 1.23.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 980 |
|  | 1.23.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 980 |
|  | 1.23.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 980 |
| 1.24 | dihedral\_style command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 980 |
|  | 1.24.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 980 |
|  | 1.24.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 981 |
|  | 1.24.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 981 |
|  | 1.24.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 982 |
|  | 1.24.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 983 |
|  | 1.24.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 983 |
| 1.25 | dihedral\_write command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 983 |
|  | 1.25.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 983 |
|  | 1.25.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 983 |
|  | 1.25.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 983 |
|  | 1.25.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 984 |
|  | 1.25.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 984 |
|  | 1.25.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 984 |
| 1.26 | dimension command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 984 |
|  | 1.26.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 984 |
|  | 1.26.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 984 |
|  | 1.26.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 984 |
|  | 1.26.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 985 |
|  | 1.26.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 985 |
|  | 1.26.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 985 |
| 1.27 | displace\_atoms command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 985 |
|  | 1.27.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 985 |
|  | 1.27.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 986 |
|  | 1.27.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 986 |
|  | 1.27.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 987 |
|  | 1.27.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 987 |
|  | 1.27.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 987 |
| 1.28 | dynamical\_matrix command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 987 |
|  | 1.28.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 987 |
|  | 1.28.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 988 |
|  | 1.28.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 988 |
|  | 1.28.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 988 |
|  | 1.28.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 989 |
|  | 1.28.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 989 |
| 1.29 | echo command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 989 |
|  | 1.29.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 989 |
|  | 1.29.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 989 |
|  | 1.29.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 989 |
|  | 1.29.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 989 |
|  | 1.29.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 989 |
|  | 1.29.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 990 |
| 1.30 | fix command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 990 |
|  | 1.30.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 990 |
|  | 1.30.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 990 |
|  | 1.30.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 990 |

* + 1. Restrictions 999
    2. Related commands 1000
    3. Default 1000
  1. fix\_modify command 1000
     1. Syntax 1000
     2. Examples 1000
     3. Description 1001
     4. Restrictions 1003
     5. Related commands 1003
     6. Default 1003
  2. fitpod command 1003
     1. Syntax 1003
     2. Examples 1003
     3. Description 1003
     4. POD Potential 1006
     5. Training 1006
     6. Validation 1007
     7. Restrictions 1007
     8. Related commands 1007
     9. Default 1007
  3. geturl command 1007
     1. Syntax 1007
     2. Examples 1008
     3. Description 1008
     4. Restrictions 1008
     5. Related commands 1008
     6. Default 1008
  4. group command 1009
     1. Syntax 1009
     2. Examples 1009
     3. Description 1010
     4. Restrictions 1013
     5. Related commands 1013
     6. Default 1013
  5. group2ndx command 1013
  6. ndx2group command 1013
     1. Syntax 1013
     2. Examples 1014
     3. Description 1014
     4. File Format 1014
     5. Restrictions 1015
     6. Related commands 1015
     7. Default 1015
  7. hyper command 1015
     1. Syntax 1015
     2. Examples 1015
     3. Description 1016
     4. Restrictions 1017
     5. Related commands 1017
     6. Default 1017
  8. if command 1018
     1. Syntax 1018
     2. Examples 1018
     3. Description 1018
     4. Restrictions 1021
     5. Related commands 1021
     6. Default 1021
  9. improper\_coeff command 1021
     1. Syntax 1021
     2. Examples 1021
     3. Description 1021
     4. Restrictions 1022
     5. Related commands 1022
     6. Default 1022
  10. improper\_style command 1022
      1. Syntax 1022
      2. Examples 1023
      3. Description 1023
      4. Restrictions 1024
      5. Related commands 1024
      6. Default 1024
  11. include command 1024
      1. Syntax 1024
      2. Examples 1024
      3. Description 1025
      4. Restrictions 1025
      5. Related commands 1025
      6. Default 1025
  12. info command 1025
      1. Syntax 1025
      2. Examples 1025
      3. Description 1026
      4. Restrictions 1027
      5. Related commands 1027
      6. Default 1027
  13. jump command 1027
      1. Syntax 1027
      2. Examples 1028
      3. Description 1028
      4. Restrictions 1029
      5. Related commands 1030
      6. Default 1030
  14. kim command 1030
      1. Syntax 1030
      2. Examples 1030
      3. Description 1030
      4. Using OpenKIM IMs with LAMMPS (*kim init*, *kim interactions*) 1031
      5. Using OpenKIM Web Queries in LAMMPS (*kim query*) 1036
      6. Accessing KIM Model Parameters from LAMMPS (*kim param*) 1039
      7. Writing material properties in standard KIM Property Instance format (*kim property*) 1043
      8. Citation of OpenKIM IMs 1049
      9. Restrictions 1049
      10. Related commands 1049
  15. kspace\_modify command 1049
      1. Syntax 1049
      2. Examples 1050
      3. Description 1051
      4. Restrictions 1055

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 1.45.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1055 |
| 1.45.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1055 |
| 1.46 | kspace\_style command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1056 |
|  | 1.46.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1056 |
|  | 1.46.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1058 |
|  | 1.46.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1058 |
|  | 1.46.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1062 |
|  | 1.46.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1063 |
|  | 1.46.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1063 |
| 1.47 | label command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1064 |
|  | 1.47.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1064 |
|  | 1.47.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1064 |
|  | 1.47.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1064 |
|  | 1.47.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1064 |
|  | 1.47.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1064 |
|  | 1.47.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1064 |
| 1.48 | labelmap command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1064 |
|  | 1.48.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1064 |
|  | 1.48.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1065 |
|  | 1.48.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1065 |
|  | 1.48.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1065 |
|  | 1.48.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1066 |
|  | 1.48.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1066 |
| 1.49 | lattice command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1066 |
|  | 1.49.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1066 |
|  | 1.49.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1066 |
|  | 1.49.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1067 |
|  | 1.49.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1070 |
|  | 1.49.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1071 |
|  | 1.49.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1071 |
| 1.50 | log command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1071 |
|  | 1.50.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1071 |
|  | 1.50.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1071 |
|  | 1.50.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1071 |
|  | 1.50.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1071 |
|  | 1.50.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1072 |
|  | 1.50.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1072 |
| 1.51 | mass command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1072 |
|  | 1.51.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1072 |
|  | 1.51.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1072 |
|  | 1.51.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1072 |
|  | 1.51.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1073 |
|  | 1.51.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1073 |
|  | 1.51.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1073 |
| 1.52 | mdi command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1073 |
|  | 1.52.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1073 |
|  | 1.52.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1074 |
|  | 1.52.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1074 |
|  | 1.52.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1078 |
|  | 1.52.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1078 |
|  | 1.52.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1078 |
| 1.53 | min\_modify command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1079 |
|  | 1.53.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1079 |
|  | 1.53.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1079 |

* + 1. Description 1079
    2. Restrictions 1081
    3. Related commands 1081
    4. Default 1081
  1. min\_style spin command 1081
  2. min\_style spin/cg command 1081
  3. min\_style spin/lbfgs command 1081
     1. Syntax 1081
     2. Examples 1081
     3. Description 1082
     4. Restrictions 1083
     5. Related commands 1083
     6. Default 1083
  4. min\_style cg command 1083
  5. min\_style hftn command 1083
  6. min\_style sd command 1083
  7. min\_style quickmin command 1083
  8. min\_style fire command 1083
  9. min\_style spin command 1083
  10. min\_style spin/cg command 1083
  11. min\_style spin/lbfgs command 1083
      1. Syntax 1083
      2. Examples 1084
      3. Description 1084
      4. Restrictions 1085
      5. Related commands 1085
      6. Default 1085
  12. minimize command 1086
      1. Syntax 1086
      2. Examples 1086
      3. Description 1086
      4. Restrictions 1090
      5. Related commands 1090
      6. Default 1090
  13. molecule command 1091
      1. Syntax 1091
      2. Examples 1091
      3. Description 1091
      4. Format of a molecule file 1093
      5. Restrictions 1100
      6. Related commands 1100
      7. Default 1100
  14. neb command 1100
      1. Syntax 1100
      2. Examples 1101
      3. Description 1101
      4. Restrictions 1106
      5. Related commands 1106
      6. Default 1106
  15. neb/spin command 1106
      1. Syntax 1106
      2. Examples 1107
      3. Description 1107
      4. Restrictions 1111

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 1.68.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1111 |
| 1.68.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1111 |
| 1.69 | neigh\_modify command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1111 |
|  | 1.69.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1111 |
|  | 1.69.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1112 |
|  | 1.69.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1113 |
|  | 1.69.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1115 |
|  | 1.69.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1115 |
|  | 1.69.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1115 |
| 1.70 | neighbor command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1115 |
|  | 1.70.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1115 |
|  | 1.70.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1116 |
|  | 1.70.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1116 |
|  | 1.70.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1117 |
|  | 1.70.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1117 |
|  | 1.70.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1117 |
| 1.71 | newton command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1117 |
|  | 1.71.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1117 |
|  | 1.71.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1118 |
|  | 1.71.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1118 |
|  | 1.71.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1118 |
|  | 1.71.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1118 |
|  | 1.71.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1118 |
| 1.72 | next command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1118 |
|  | 1.72.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1118 |
|  | 1.72.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1119 |
|  | 1.72.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1119 |
|  | 1.72.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1120 |
|  | 1.72.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1121 |
|  | 1.72.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1121 |
| 1.73 | package command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1121 |
|  | 1.73.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1121 |
|  | 1.73.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1123 |
|  | 1.73.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1123 |
|  | 1.73.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1130 |
|  | 1.73.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1130 |
|  | 1.73.6 Defaults . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1130 |
| 1.74 | pair\_coeff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1131 |
|  | 1.74.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1131 |
|  | 1.74.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1131 |
|  | 1.74.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1131 |
|  | 1.74.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1133 |
|  | 1.74.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1133 |
|  | 1.74.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1133 |
| 1.75 | pair\_modify command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1133 |
|  | 1.75.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1133 |
|  | 1.75.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1134 |
|  | 1.75.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1134 |
|  | 1.75.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1137 |
|  | 1.75.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1137 |
|  | 1.75.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1137 |
| 1.76 | pair\_style command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1138 |
|  | 1.76.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1138 |
|  | 1.76.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1138 |

* + 1. Description 1138
    2. Restrictions 1147
    3. Related commands 1147
    4. Default 1147
  1. pair\_write command 1147
     1. Syntax 1147
     2. Examples 1148
     3. Description 1148
     4. Restrictions 1148
     5. Related commands 1148
     6. Default 1149
  2. partition command 1149
     1. Syntax 1149
     2. Examples 1149
     3. Description 1149
     4. Restrictions 1150
     5. Related commands 1150
     6. Default 1150
  3. plugin command 1150
     1. Syntax 1150
     2. Examples 1150
     3. Description 1150
     4. Restrictions 1151
     5. Related commands 1151
     6. Default 1151
  4. prd command 1151
     1. Syntax 1151
     2. Examples 1152
     3. Description 1152
     4. Restrictions 1155
     5. Related commands 1155
     6. Default 1155
  5. print command 1155
     1. Syntax 1155
     2. Examples 1156
     3. Description 1156
     4. Restrictions 1157
     5. Related commands 1157
     6. Default 1157
  6. processors command 1157
     1. Syntax 1157
     2. Examples 1158
     3. Description 1158
     4. Restrictions 1161
     5. Related commands 1162
     6. Default 1162
  7. python command 1162
     1. Syntax 1162
     2. Examples 1163
     3. Description 1163
     4. Restrictions 1169
     5. Related commands 1169
     6. Default 1169
  8. quit command 1170
     1. Syntax 1170
     2. Examples 1170
     3. Description 1170
     4. Restrictions 1170
     5. Related commands 1170
     6. Default 1170
  9. read\_data command 1170
     1. Syntax 1170
     2. Examples 1171
     3. Description 1172
     4. Reading multiple data files 1172
     5. Format of a data file 1174
     6. Format of the header of a data file 1175
     7. Header specification of the simulation box size and shape 1176
     8. Meaning of other header keywords 1179
     9. Format of the body of a data file 1179
     10. Restrictions 1194
     11. Related commands 1194
     12. Default 1194
  10. read\_dump command 1194
      1. Syntax 1194
      2. Examples 1195
      3. Description 1196
      4. Restrictions 1199
      5. Related commands 1199
      6. Default 1200
  11. read\_restart command 1200
      1. Syntax 1200
      2. Examples 1200
      3. Description 1200
      4. Restrictions 1203
      5. Related commands 1203
      6. Default 1203
  12. region command 1203
      1. Syntax 1203
      2. Examples 1205
      3. Description 1205
      4. Restrictions 1209
      5. Related commands 1209
      6. Default 1209
  13. replicate command 1209
      1. Syntax 1209
      2. Examples 1209
      3. Description 1210
      4. Restrictions 1211
      5. Related commands 1211
      6. Default 1211
  14. rerun command 1211
      1. Syntax 1211
      2. Examples 1212
      3. Description 1212
      4. Restrictions 1214
      5. Related commands 1214
      6. Default 1214
  15. reset\_atoms command 1214
      1. Syntax 1214
      2. Examples 1215
      3. Description 1215
      4. Restrictions 1217
      5. Related commands 1218
      6. Defaults 1218
  16. reset\_timestep command 1218
      1. Syntax 1218
      2. Examples 1218
      3. Description 1218
      4. Restrictions 1219
      5. Related commands 1219
      6. Default 1219
  17. restart command 1219
      1. Syntax 1219
      2. Examples 1220
      3. Description 1220
      4. Restrictions 1221
      5. Related commands 1221
      6. Default 1221
  18. run command 1221
      1. Syntax 1221
      2. Examples 1222
      3. Description 1222
      4. Restrictions 1224
      5. Related commands 1224
      6. Default 1224
  19. run\_style command 1224
      1. Syntax 1224
      2. Examples 1225
      3. Description 1225
      4. Restrictions 1228
      5. Related commands 1229
      6. Default 1229
  20. set command 1229
      1. Syntax 1229
      2. Examples 1232
      3. Description 1232
      4. Restrictions 1237
      5. Related commands 1237
      6. Default 1237
  21. shell command 1237
      1. Syntax 1237
      2. Examples 1238
      3. Description 1238
      4. Restrictions 1239
      5. Related commands 1239
      6. Default 1239
  22. special\_bonds command 1239
      1. Syntax 1239
      2. Examples 1239
      3. Description 1240
      4. Restrictions 1242

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 1.98.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1242 |
| 1.98.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1243 |
| 1.99 | suffix command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1243 |
|  | 1.99.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1243 |
|  | 1.99.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1243 |
|  | 1.99.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1243 |
|  | 1.99.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1244 |
|  | 1.99.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1244 |
|  | 1.99.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1244 |
| 1.100 | tad command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1245 |
|  | 1.100.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1245 |
|  | 1.100.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1245 |
|  | 1.100.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1246 |
|  | 1.100.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1248 |
|  | 1.100.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1248 |
|  | 1.100.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1248 |
| 1.101 | temper command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1249 |
|  | 1.101.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1249 |
|  | 1.101.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1249 |
|  | 1.101.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1249 |
|  | 1.101.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1251 |
|  | 1.101.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1251 |
|  | 1.101.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1251 |
| 1.102 | temper/grem command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1251 |
|  | 1.102.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1251 |
|  | 1.102.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1251 |
|  | 1.102.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1252 |
|  | 1.102.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1253 |
|  | 1.102.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1253 |
|  | 1.102.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1253 |
| 1.103 | temper/npt command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1253 |
|  | 1.103.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1253 |
|  | 1.103.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1253 |
|  | 1.103.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1254 |
|  | 1.103.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1254 |
|  | 1.103.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1254 |
|  | 1.103.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1254 |
| 1.104 | thermo command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1254 |
|  | 1.104.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1254 |
|  | 1.104.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1255 |
|  | 1.104.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1255 |
|  | 1.104.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1255 |
|  | 1.104.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1255 |
|  | 1.104.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1255 |
| 1.105 | thermo\_modify command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1255 |
|  | 1.105.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1255 |
|  | 1.105.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1256 |
|  | 1.105.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1256 |
|  | 1.105.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1259 |
|  | 1.105.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1259 |
|  | 1.105.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1259 |
| 1.106 | thermo\_style command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1259 |
|  | 1.106.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1259 |
|  | 1.106.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1261 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 1.106.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1261 |
|  | 1.106.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1266 |
|  | 1.106.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1266 |
|  | 1.106.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1266 |
| 1.107 | third\_order command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1266 |
|  | 1.107.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1266 |
|  | 1.107.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1266 |
|  | 1.107.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1267 |
|  | 1.107.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1267 |
|  | 1.107.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1267 |
|  | 1.107.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1267 |
| 1.108 | timer command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1268 |
|  | 1.108.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1268 |
|  | 1.108.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1268 |
|  | 1.108.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1268 |
|  | 1.108.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1269 |
|  | 1.108.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1269 |
|  | 1.108.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1269 |
| 1.109 | timestep command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1269 |
|  | 1.109.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1269 |
|  | 1.109.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1270 |
|  | 1.109.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1270 |
|  | 1.109.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1270 |
|  | 1.109.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1270 |
|  | 1.109.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1270 |
| 1.110 | uncompute command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1270 |
|  | 1.110.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1270 |
|  | 1.110.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1271 |
|  | 1.110.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1271 |
|  | 1.110.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1271 |
|  | 1.110.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1271 |
|  | 1.110.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1271 |
| 1.111 | undump command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1271 |
|  | 1.111.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1271 |
|  | 1.111.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1271 |
|  | 1.111.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1271 |
|  | 1.111.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1272 |
|  | 1.111.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1272 |
|  | 1.111.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1272 |
| 1.112 | unfix command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1272 |
|  | 1.112.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1272 |
|  | 1.112.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1272 |
|  | 1.112.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1272 |
|  | 1.112.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1272 |
|  | 1.112.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1272 |
|  | 1.112.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1273 |
| 1.113 | units command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1273 |
|  | 1.113.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1273 |
|  | 1.113.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1273 |
|  | 1.113.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1273 |
|  | 1.113.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1277 |
|  | 1.113.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1277 |
|  | 1.113.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1277 |
| 1.114 | variable command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1278 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 1.114.1 | Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1278 |
| 1.114.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1279 |
| 1.114.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1280 |
| 1.114.4 | Immediate Evaluation of Variables . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1297 |
| 1.114.5 | Variable Accuracy . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1298 |
| 1.114.6 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1299 |
| 1.114.7 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1299 |
| 1.114.8 | Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1299 |
| 1.115 | velocity | command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1299 |
|  | 1.115.1 | Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1299 |
|  | 1.115.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1300 |
|  | 1.115.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1300 |
|  | 1.115.4 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1302 |
|  | 1.115.5 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1302 |
|  | 1.115.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1302 |
| 1.116 | write\_coeff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1302 |
|  | 1.116.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1302 |
|  | 1.116.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1303 |
|  | 1.116.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1303 |
|  | 1.116.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1303 |
|  | 1.116.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1303 |
| 1.117 | write\_data command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1303 |
|  | 1.117.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1303 |
|  | 1.117.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1304 |
|  | 1.117.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1304 |
|  | 1.117.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1305 |
|  | 1.117.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1306 |
|  | 1.117.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1306 |
| 1.118 | write\_dump command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1306 |
|  | 1.118.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1306 |
|  | 1.118.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1306 |
|  | 1.118.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1307 |
|  | 1.118.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1307 |
|  | 1.118.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1307 |
|  | 1.118.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1307 |
| 1.119 | write\_restart command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1307 |
|  | 1.119.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1307 |
|  | 1.119.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1308 |
|  | 1.119.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1308 |
|  | 1.119.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1309 |
|  | 1.119.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1309 |
|  | 1.119.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1309 |
| **2 Fixes** |  | | **1311** |
| 2.1 | fix accelerate/cos command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1311 |
|  | 2.1.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1311 |
|  | 2.1.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1311 |
|  | 2.1.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1311 |
|  | 2.1.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1312 |
|  | 2.1.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1312 |
|  | 2.1.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1312 |
|  | 2.1.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1312 |
| 2.2 | fix acks2/reaxff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1312 |
|  | 2.2.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 1313 |

* + 1. Examples 1313
    2. Description 1313
    3. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1314
    4. Restrictions 1314
    5. Related commands 1314
    6. Default 1315
  1. fix adapt command 1315
     1. Syntax 1315
     2. Examples 1316
     3. Description 1316
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1320
     5. Restrictions 1320
     6. Related commands 1321
     7. Default 1321
  2. fix adapt/fep command 1321
     1. Syntax 1321
     2. Examples 1322
     3. Description 1322
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1325
     5. Restrictions 1325
     6. Related commands 1325
     7. Default 1325
  3. fix add/heat command 1325
     1. Syntax 1325
     2. Examples 1326
     3. Description 1326
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1326
     5. Restrictions 1326
     6. Related commands 1327
     7. Default 1327
  4. fix addforce command 1327
     1. Syntax 1327
     2. Examples 1327
     3. Description 1327
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1329
     5. Restrictions 1329
     6. Related commands 1329
     7. Default 1329
  5. fix addtorque command 1330
     1. Syntax 1330
     2. Examples 1330
     3. Description 1330
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1330
     5. Restrictions 1331
     6. Related commands 1331
     7. Default 1331
  6. fix alchemy command 1331
     1. Syntax 1331
     2. Examples 1332
     3. Description 1332
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1333
     5. Restrictions 1333
     6. Related commands 1334
     7. Default 1334
  7. fix amoeba/bitorsion command 1334
     1. Syntax 1334
     2. Examples 1334
     3. Description 1334
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1335
     5. Restrictions 1336
     6. Related commands 1336
     7. Default 1336
  8. fix amoeba/pitorsion command 1336
     1. Syntax 1336
     2. Examples 1336
     3. Description 1336
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1337
     5. Restrictions 1338
     6. Related commands 1338
     7. Default 1338
  9. fix append/atoms command 1338
     1. Syntax 1338
     2. Examples 1339
     3. Description 1339
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1340
     5. Restrictions 1340
     6. Related commands 1340
     7. Default 1340
  10. fix atc command 1340
      1. Syntax 1340
      2. Examples 1341
      3. Description 1341
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1343
      5. Restrictions 1343
      6. Related commands 1343
      7. Default 1345
  11. fix atom/swap command 1346
      1. Syntax 1346
      2. Examples 1347
      3. Description 1347
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1348
      5. Restrictions 1348
      6. Related commands 1349
      7. Default 1349
  12. fix ave/atom command 1349
      1. Syntax 1349
      2. Examples 1349
      3. Description 1350
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1351
      5. Restrictions 1351
      6. Related commands 1351
      7. Default 1352
  13. fix ave/chunk command 1352
      1. Syntax 1352
      2. Examples 1353
      3. Description 1353
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1358
      5. Restrictions 1358

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.15.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1358 |
| 2.15.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1358 |
| 2.16 | fix ave/correlate command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1359 |
|  | 2.16.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1359 |
|  | 2.16.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1360 |
|  | 2.16.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1360 |
|  | 2.16.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1363 |
|  | 2.16.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1363 |
|  | 2.16.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1364 |
|  | 2.16.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1364 |
| 2.17 | fix ave/correlate/long command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1364 |
|  | 2.17.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1364 |
|  | 2.17.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1365 |
|  | 2.17.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1365 |
|  | 2.17.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1366 |
|  | 2.17.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1366 |
|  | 2.17.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1366 |
|  | 2.17.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1366 |
| 2.18 | fix ave/grid command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1366 |
|  | 2.18.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1366 |
|  | 2.18.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1368 |
|  | 2.18.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1368 |
|  | 2.18.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1372 |
|  | 2.18.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1372 |
|  | 2.18.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1373 |
|  | 2.18.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1373 |
| 2.19 | fix ave/histo command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1373 |
| 2.20 | fix ave/histo/weight command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1373 |
|  | 2.20.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1373 |
|  | 2.20.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1374 |
|  | 2.20.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1374 |
|  | 2.20.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1377 |
|  | 2.20.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1378 |
|  | 2.20.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1378 |
|  | 2.20.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1378 |
| 2.21 | fix ave/spatial command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1378 |
| 2.22 | fix ave/spatial/sphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1378 |
| 2.23 | fix ave/time command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1378 |
|  | 2.23.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1378 |
|  | 2.23.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1380 |
|  | 2.23.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1380 |
|  | 2.23.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1383 |
|  | 2.23.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1383 |
|  | 2.23.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1383 |
|  | 2.23.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1384 |
| 2.24 | fix aveforce command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1384 |
|  | 2.24.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1384 |
|  | 2.24.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1384 |
|  | 2.24.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1384 |
|  | 2.24.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1385 |
|  | 2.24.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1385 |
|  | 2.24.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1385 |
|  | 2.24.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1385 |
| 2.25 | fix balance command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1386 |

* + 1. Syntax 1386
    2. Examples 1386
    3. Description 1387
    4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1391
    5. Restrictions 1391
    6. Related commands 1391
    7. Default 1391
  1. fix bocs command 1391
     1. Syntax 1391
     2. Examples 1392
     3. Description 1392
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1393
     5. Restrictions 1393
     6. Further information 1393
  2. fix bond/break command 1394
     1. Syntax 1394
     2. Examples 1394
     3. Description 1394
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1395
     5. Restrictions 1396
     6. Related commands 1396
     7. Default 1396
  3. fix bond/create command 1396
  4. fix bond/create/angle command 1396
     1. Syntax 1396
     2. Examples 1397
     3. Description 1397
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1399
     5. Restrictions 1399
     6. Related commands 1400
     7. Default 1400
  5. fix bond/react command 1400
     1. Syntax 1400
     2. Examples 1401
     3. Description 1402
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1409
     5. Restrictions 1410
     6. Related commands 1410
     7. Default 1410
  6. fix bond/swap command 1410
     1. Syntax 1410
     2. Examples 1410
     3. Description 1411
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1413
     5. Restrictions 1413
     6. Related commands 1414
     7. Default 1414
  7. fix box/relax command 1414
     1. Syntax 1414
     2. Examples 1414
     3. Description 1415
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1418
     5. Restrictions 1418
     6. Related commands 1419

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.32.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1419 |
| 2.33 | fix brownian command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1419 |
| 2.34 | fix brownian/sphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1419 |
| 2.35 | fix brownian/asphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1419 |
|  | 2.35.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1419 |
|  | 2.35.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1420 |
|  | 2.35.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1420 |
|  | 2.35.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1422 |
|  | 2.35.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1422 |
|  | 2.35.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1422 |
|  | 2.35.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1422 |
| 2.36 | fix charge/regulation command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1422 |
|  | 2.36.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1422 |
|  | 2.36.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1423 |
|  | 2.36.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1423 |
|  | 2.36.4 Output . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1425 |
|  | 2.36.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1426 |
|  | 2.36.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1426 |
|  | 2.36.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1426 |
| 2.37 | fix cmap command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1426 |
|  | 2.37.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1426 |
|  | 2.37.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1427 |
|  | 2.37.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1427 |
|  | 2.37.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1428 |
|  | 2.37.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1428 |
|  | 2.37.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1428 |
|  | 2.37.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1428 |
| 2.38 | fix colvars command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1429 |
|  | 2.38.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1429 |
|  | 2.38.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1429 |
|  | 2.38.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1429 |
|  | 2.38.4 Restarting . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1430 |
|  | 2.38.5 Output . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1430 |
|  | 2.38.6 Controlling Colvars via *fix\_modify* . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1431 |
|  | 2.38.7 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1431 |
|  | 2.38.8 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1432 |
| 2.39 | fix controller command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1432 |
|  | 2.39.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1432 |
|  | 2.39.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1432 |
|  | 2.39.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1433 |
|  | 2.39.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1434 |
|  | 2.39.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1435 |
|  | 2.39.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1435 |
|  | 2.39.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1435 |
| 2.40 | fix damping/cundall command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1435 |
|  | 2.40.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1435 |
|  | 2.40.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1435 |
|  | 2.40.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1436 |
|  | 2.40.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1436 |
|  | 2.40.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1437 |
|  | 2.40.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1437 |
|  | 2.40.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1437 |
|  | 2.40.8 References . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1437 |
| 2.41 | fix deform command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1437 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.41.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1437 |
|  | 2.41.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1439 |
|  | 2.41.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1439 |
|  | 2.41.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1445 |
|  | 2.41.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1445 |
|  | 2.41.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1445 |
|  | 2.41.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1445 |
| 2.42 | fix deform/pressure command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1445 |
|  | 2.42.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1445 |
|  | 2.42.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1447 |
|  | 2.42.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1447 |
|  | 2.42.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1450 |
|  | 2.42.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1450 |
|  | 2.42.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1450 |
|  | 2.42.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1450 |
| 2.43 | fix deposit command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1450 |
|  | 2.43.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1450 |
|  | 2.43.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1452 |
|  | 2.43.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1452 |
|  | 2.43.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1454 |
|  | 2.43.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1455 |
|  | 2.43.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1455 |
|  | 2.43.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1455 |
| 2.44 | fix dpd/energy command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1455 |
|  | 2.44.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1455 |
|  | 2.44.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1455 |
|  | 2.44.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1456 |
|  | 2.44.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1456 |
|  | 2.44.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1456 |
|  | 2.44.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1457 |
| 2.45 | fix edpd/source command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1457 |
| 2.46 | fix tdpd/source command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1457 |
|  | 2.46.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1457 |
|  | 2.46.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1457 |
|  | 2.46.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1458 |
|  | 2.46.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1458 |
|  | 2.46.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1458 |
|  | 2.46.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1458 |
|  | 2.46.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1458 |
| 2.47 | fix drag command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1459 |
|  | 2.47.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1459 |
|  | 2.47.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1459 |
|  | 2.47.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1459 |
|  | 2.47.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1459 |
|  | 2.47.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1459 |
|  | 2.47.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1460 |
|  | 2.47.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1460 |
| 2.48 | fix drude command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1460 |
|  | 2.48.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1460 |
|  | 2.48.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1460 |
|  | 2.48.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1460 |
|  | 2.48.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1460 |
|  | 2.48.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1461 |
|  | 2.48.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1461 |

* 1. fix drude/transform/direct command 1461
  2. fix drude/transform/inverse command 1461
     1. Syntax 1461
     2. Examples 1461
     3. Description 1461
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1463
     5. Restrictions 1463
     6. Related commands 1464
     7. Default 1464
  3. fix dt/reset command 1464
     1. Syntax 1464
     2. Examples 1464
     3. Description 1465
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1465
     5. Restrictions 1466
     6. Related commands 1466
     7. Default 1466
  4. fix efield command 1466
  5. fix efield/tip4p command 1466
     1. Syntax 1466
     2. Examples 1466
     3. Description 1467
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1468
     5. Restrictions 1469
     6. Related commands 1469
     7. Default 1469
  6. fix ehex command 1469
     1. Syntax 1469
     2. Examples 1470
     3. Description 1470
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1471
     5. Restrictions 1472
     6. Related commands 1472
     7. Default 1472
  7. fix electrode/conp command 1472
  8. fix electrode/conq command 1472
  9. fix electrode/thermo command 1472
     1. Syntax 1472
     2. Examples 1473
     3. Description 1473
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1476
     5. Restrictions 1477
     6. Default 1477
  10. fix electron/stopping command 1478
  11. fix electron/stopping/fit command 1478
      1. Syntax 1478
      2. Examples 1478
      3. Description 1479
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1480
      5. Restrictions 1480
      6. Default 1480
  12. fix enforce2d command 1481
      1. Syntax 1481
      2. Examples 1481
      3. Description 1481
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1482
      5. Restrictions 1482
      6. Related commands 1482
      7. Default 1482
  13. fix eos/cv command 1482
      1. Syntax 1482
      2. Examples 1482
      3. Description 1482
      4. Restrictions 1483
      5. Related commands 1483
      6. Default 1483
  14. fix eos/table command 1483
      1. Syntax 1483
      2. Examples 1483
      3. Description 1484
      4. Restrictions 1485
      5. Related commands 1485
      6. Default 1485
  15. fix eos/table/rx command 1485
      1. Syntax 1485
      2. Examples 1486
      3. Description 1486
      4. Restrictions 1488
      5. Related commands 1488
      6. Default 1488
  16. fix evaporate command 1488
      1. Syntax 1488
      2. Examples 1489
      3. Description 1489
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1489
      5. Restrictions 1490
      6. Related commands 1490
      7. Default 1490
  17. fix external command 1490
      1. Syntax 1490
      2. Examples 1490
      3. Description 1490
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1492
      5. Restrictions 1492
      6. Related commands 1492
      7. Default 1492
  18. fix ffl command 1493
      1. Syntax 1493
      2. Examples 1493
      3. Description 1493
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1494
      5. Restrictions 1494
      6. Related commands 1494
  19. fix filter/corotate command 1494
      1. Syntax 1494
      2. Examples 1495
      3. Description 1495
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1495

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.67.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1495 |
| 2.67.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1495 |
| 2.67.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1495 |
| 2.68 | fix flow/gauss command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1496 |
|  | 2.68.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1496 |
|  | 2.68.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1496 |
|  | 2.68.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1496 |
|  | 2.68.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1497 |
|  | 2.68.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1498 |
|  | 2.68.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1498 |
|  | 2.68.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1498 |
| 2.69 | fix freeze command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1498 |
|  | 2.69.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1498 |
|  | 2.69.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1498 |
|  | 2.69.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1498 |
|  | 2.69.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1499 |
|  | 2.69.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1499 |
|  | 2.69.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1499 |
|  | 2.69.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1499 |
| 2.70 | fix gcmc command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1499 |
|  | 2.70.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1499 |
|  | 2.70.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1500 |
|  | 2.70.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1501 |
|  | 2.70.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1504 |
|  | 2.70.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1505 |
|  | 2.70.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1506 |
|  | 2.70.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1506 |
| 2.71 | fix gld command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1506 |
|  | 2.71.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1506 |
|  | 2.71.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1506 |
|  | 2.71.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1507 |
|  | 2.71.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1508 |
|  | 2.71.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1508 |
|  | 2.71.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1508 |
|  | 2.71.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1508 |
| 2.72 | fix gle command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1508 |
|  | 2.72.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1508 |
|  | 2.72.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1509 |
|  | 2.72.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1509 |
|  | 2.72.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1510 |
|  | 2.72.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1510 |
|  | 2.72.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1510 |
| 2.73 | fix gravity command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1511 |
|  | 2.73.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1511 |
|  | 2.73.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1511 |
|  | 2.73.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1511 |
|  | 2.73.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1512 |
|  | 2.73.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1512 |
|  | 2.73.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1513 |
|  | 2.73.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1513 |
| 2.74 | fix grem command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1513 |
|  | 2.74.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1513 |
|  | 2.74.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1513 |
|  | 2.74.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1513 |

* + 1. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1514
    2. Restrictions 1514
    3. Related commands 1514
    4. Default 1514
  1. fix halt command 1515
     1. Syntax 1515
     2. Examples 1515
     3. Description 1515
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1517
     5. Restrictions 1517
     6. Related commands 1517
     7. Default 1517
  2. fix heat command 1517
     1. Syntax 1517
     2. Examples 1517
     3. Description 1518
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1519
     5. Restrictions 1519
     6. Related commands 1519
     7. Default 1519
  3. fix heat/flow command 1519
     1. Syntax 1519
     2. Examples 1520
     3. Description 1520
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1520
     5. Restrictions 1520
     6. Related commands 1520
     7. Default 1520
  4. fix hyper/global command 1520
     1. Syntax 1520
     2. Examples 1521
     3. Description 1521
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1523
     5. Restrictions 1524
     6. Related commands 1524
     7. Default 1524
  5. fix hyper/local command 1524
     1. Syntax 1524
     2. Examples 1525
     3. Description 1525
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1529
     5. Restrictions 1531
     6. Related commands 1531
     7. Default 1531
  6. fix imd command 1531
     1. Syntax 1531
     2. Examples 1532
     3. Description 1532
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1533
     5. Restrictions 1533
     6. Related commands 1533
     7. Default 1533
  7. fix indent command 1534
     1. Syntax 1534
     2. Examples 1535
     3. Description 1535
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1536
     5. Restrictions 1537
     6. Related commands 1537
     7. Default 1537
  8. fix ipi command 1537
     1. Syntax 1537
     2. Examples 1537
     3. Description 1538
     4. Obtaining i-PI 1538
     5. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1539
     6. Restrictions 1539
     7. Related commands 1539
  9. fix langevin command 1539
     1. Syntax 1539
     2. Examples 1540
     3. Description 1540
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1543
     5. Restrictions 1543
     6. Related commands 1543
     7. Default 1543
  10. fix langevin/drude command 1544
      1. Syntax 1544
      2. Examples 1544
      3. Description 1544
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1547
      5. Restrictions 1547
      6. Related commands 1548
      7. Default 1548
  11. fix langevin/eff command 1548
      1. Syntax 1548
      2. Examples 1548
      3. Description 1549
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1549
      5. Restrictions 1549
      6. Related commands 1550
      7. Default 1550
  12. fix langevin/spin command 1550
      1. Syntax 1550
      2. Examples 1550
      3. Description 1550
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1551
      5. Restrictions 1551
      6. Related commands 1551
      7. Default 1551
  13. fix lb/fluid command 1552
      1. Syntax 1552
      2. Examples 1553
      3. Description 1553
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1556
      5. Restrictions 1557
      6. Related commands 1557
      7. Default 1557
  14. fix lb/momentum command 1557
      1. Syntax 1557
      2. Examples 1558
      3. Description 1558
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1558
      5. Restrictions 1558
      6. Related commands 1558
      7. Default 1559
  15. fix lb/viscous command 1559
      1. Syntax 1559
      2. Examples 1559
      3. Description 1559
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1559
      5. Restrictions 1560
      6. Related commands 1560
      7. Default 1560
  16. fix lineforce command 1560
      1. Syntax 1560
      2. Examples 1560
      3. Description 1560
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1561
      5. Restrictions 1561
      6. Related commands 1561
      7. Default 1561
  17. fix manifoldforce command 1561
      1. Syntax 1561
      2. Examples 1561
      3. Description 1561
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1562
      5. Restrictions 1562
      6. Related commands 1562
  18. fix mdi/qm command 1562
      1. Syntax 1562
      2. Examples 1563
      3. Description 1563
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1565
      5. Restrictions 1566
      6. Related commands 1566
      7. Default 1566
  19. fix mdi/qmmm command 1566
      1. Syntax 1566
      2. Examples 1567
      3. Description 1567
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1569
      5. Restrictions 1569
      6. Related commands 1570
      7. Default 1570
  20. fix meso/move command 1570
      1. Syntax 1570
      2. Examples 1570
      3. Description 1571
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1573
      5. Restrictions 1573
      6. Related commands 1573

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 2.94.7 | Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1573 |
| 2.95 | fix\_modify | AtC commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1573 |
|  | 2.95.1 | fix\_modify AtC add\_molecule command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1573 |
|  | 2.95.2 | fix\_modify AtC add\_species command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1574 |
|  | 2.95.3 | fix\_modify AtC atom\_element\_map command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1575 |
|  | 2.95.4 | fix\_modify AtC atom\_weight command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1576 |
|  | 2.95.5 | fix\_modify AtC atomic\_charge command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1577 |
|  | 2.95.6 | fix\_modify AtC boundary\_dynamics command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1578 |
|  | 2.95.7 | fix\_modify AtC boundary\_faceset command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1579 |
|  | 2.95.8 | fix\_modify AtC boundary type command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1580 |
|  | 2.95.9 | fix\_modify AtC consistent\_fe\_initialization command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1580 |
|  | 2.95.10 | fix\_modify AtC control localized\_lambda command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1581 |
|  | 2.95.11 | fix\_modify AtC control momentum command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1582 |
|  | 2.95.12 | fix\_modify AtC control thermal command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1583 |
|  | 2.95.13 | fix\_modify AtC decomposition command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1585 |
|  | 2.95.14 | fix\_modify AtC extrinsic electron\_integration command . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1586 |
|  | 2.95.15 | fix\_modify AtC equilibrium\_start command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1587 |
|  | 2.95.16 | fix\_modify AtC extrinsic exchange command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1587 |
|  | 2.95.17 | fix\_modify AtC fe\_md\_boundary command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1588 |
|  | 2.95.18 | fix\_modify AtC filter scale command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1589 |
|  | 2.95.19 | fix\_modify AtC filter type command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1590 |
|  | 2.95.20 | fix\_modify AtC fix command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1591 |
|  | 2.95.21 | fix\_modify AtC fix\_flux command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1592 |
|  | 2.95.22 | fix\_modify AtC computes command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1592 |
|  | 2.95.23 | fix\_modify AtC fields command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1593 |
|  | 2.95.24 | fix\_modify AtC gradients command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1595 |
|  | 2.95.25 | fix\_modify AtC kernel command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1597 |
|  | 2.95.26 | fix\_modify AtC on\_the\_fly command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1598 |
|  | 2.95.27 | fix\_modify AtC rates command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1599 |
|  | 2.95.28 | fix\_modify AtC initial command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1601 |
|  | 2.95.29 | fix\_modify AtC internal\_element\_set command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1601 |
|  | 2.95.30 | fix\_modify AtC internal\_quadrature command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1602 |
|  | 2.95.31 | fix\_modify AtC kernel\_bandwidth command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1603 |
|  | 2.95.32 | fix\_modify AtC control lumped\_lambda\_solve command . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1604 |
|  | 2.95.33 | fix\_modify AtC control mask\_direction command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1605 |
|  | 2.95.34 | fix\_modify AtC mass\_matrix command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1605 |
|  | 2.95.35 | fix\_modify AtC material command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1606 |
|  | 2.95.36 | fix\_modify AtC mesh add\_to\_nodeset command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1607 |
|  | 2.95.37 | fix\_modify AtC mesh create command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1608 |
|  | 2.95.38 | fix\_modify AtC mesh create\_elementset command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1609 |
|  | 2.95.39 | fix\_modify AtC mesh create\_faceset box command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1610 |
|  | 2.95.40 | fix\_modify AtC mesh create\_faceset plane command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1611 |
|  | 2.95.41 | fix\_modify AtC mesh create\_nodeset command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1612 |
|  | 2.95.42 | fix\_modify AtC mesh delete\_elements command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1612 |
|  | 2.95.43 | fix\_modify AtC mesh nodeset\_to\_elementset command . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1613 |
|  | 2.95.44 | fix\_modify AtC mesh output command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1614 |
|  | 2.95.45 | fix\_modify AtC mesh quadrature command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1615 |
|  | 2.95.46 | fix\_modify AtC mesh read command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1616 |
|  | 2.95.47 | fix\_modify AtC mesh write command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1617 |
|  | 2.95.48 | fix\_modify AtC output command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1617 |
|  | 2.95.49 | fix\_modify AtC output boundary\_integral command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1618 |
|  | 2.95.50 | fix\_modify AtC output contour\_integral command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1619 |
|  | 2.95.51 | fix\_modify AtC output nodeset command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1620 |
|  | 2.95.52 | fix\_modify AtC output volume\_integral command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1621 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.95.53 fix\_modify AtC pair\_interactions command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1622 |
| 2.95.54 fix\_modify AtC bond\_interactions command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1622 |
| 2.95.55 fix\_modify AtC poisson\_solver command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1623 |
| 2.95.56 fix\_modify AtC read\_restart command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1624 |
| 2.95.57 fix\_modify AtC remove\_molecule command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1624 |
| 2.95.58 fix\_modify AtC remove\_source command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1625 |
| 2.95.59 fix\_modify AtC remove\_species command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1626 |
| 2.95.60 fix\_modify AtC reset\_atomic\_reference\_positions command . . . . . . . . . . . . . . . | 1627 |
| 2.95.61 fix\_modify AtC reset\_time command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1628 |
| 2.95.62 fix\_modify AtC sample\_frequency command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1628 |
| 2.95.63 fix\_modify AtC set reference\_potential\_energy command . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1629 |
| 2.95.64 fix\_modify AtC source command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1630 |
| 2.95.65 fix\_modify AtC source\_integration command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1631 |
| 2.95.66 fix\_modify AtC temperature\_definition command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1632 |
| 2.95.67 fix\_modify AtC filter command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1632 |
| 2.95.68 fix\_modify AtC time\_integration command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1633 |
| 2.95.69 fix\_modify AtC track\_displacement command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1634 |
| 2.95.70 fix\_modify AtC unfix command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1635 |
| 2.95.71 fix\_modify AtC unfix\_flux command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1636 |
| 2.95.72 fix\_modify AtC write\_atom\_weights command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1637 |
| 2.95.73 fix\_modify AtC write\_restart command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1637 |
| 2.96 | fix mol/swap command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1638 |
|  | 2.96.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1638 |
|  | 2.96.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1639 |
|  | 2.96.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1639 |
|  | 2.96.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1640 |
|  | 2.96.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1640 |
|  | 2.96.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1640 |
|  | 2.96.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1641 |
| 2.97 | fix momentum command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1641 |
| 2.98 | fix momentum/chunk command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1641 |
|  | 2.98.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1641 |
|  | 2.98.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1641 |
|  | 2.98.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1642 |
|  | 2.98.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1642 |
|  | 2.98.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1642 |
|  | 2.98.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1643 |
|  | 2.98.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1643 |
| 2.99 | fix move command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1643 |
|  | 2.99.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1643 |
|  | 2.99.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1644 |
|  | 2.99.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1644 |
|  | 2.99.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1646 |
|  | 2.99.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1646 |
|  | 2.99.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1646 |
|  | 2.99.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1646 |
| 2.100 | fix msst command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1647 |
|  | 2.100.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1647 |
|  | 2.100.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1647 |
|  | 2.100.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1647 |
|  | 2.100.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1648 |
|  | 2.100.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1649 |
|  | 2.100.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1649 |
|  | 2.100.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1649 |

* 1. fix mvv/dpd command 1650
  2. fix mvv/edpd command 1650
  3. fix mvv/tdpd command 1650
     1. Syntax 1650
     2. Examples 1650
     3. Description 1650
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1651
     5. Restrictions 1651
     6. Related commands 1651
     7. Default 1651
  4. fix neb command 1651
     1. Syntax 1651
     2. Examples 1652
     3. Description 1652
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1654
     5. Restrictions 1654
     6. Related commands 1654
     7. Default 1654
  5. fix neb/spin command 1655
     1. Syntax 1655
     2. Examples 1655
     3. Description 1655
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1655
     5. Restrictions 1656
     6. Related commands 1656
     7. Default 1656
  6. fix nvt command 1656
  7. fix npt command 1656
  8. fix nph command 1656
     1. Syntax 1656
     2. Examples 1657
     3. Description 1657
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1663
     5. Restrictions 1664
     6. Related commands 1665
     7. Default 1665
  9. fix nvt/eff command 1665
  10. fix npt/eff command 1665
  11. fix nph/eff command 1665
      1. Syntax 1665
      2. Examples 1666
      3. Description 1666
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1667
      5. Restrictions 1667
      6. Related commands 1667
      7. Default 1667
  12. fix nvt/uef command 1668
  13. fix npt/uef command 1668
      1. Syntax 1668
      2. Examples 1668
      3. Description 1668
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1670
      5. Restrictions 1671
      6. Related commands 1671

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.113.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1671 |
| 2.114 | fix nonaffine/displacement command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1671 |
|  | 2.114.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1671 |
|  | 2.114.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1672 |
|  | 2.114.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1672 |
|  | 2.114.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1673 |
|  | 2.114.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1673 |
|  | 2.114.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1673 |
|  | 2.114.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1673 |
| 2.115 | fix nph/asphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1673 |
|  | 2.115.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1673 |
|  | 2.115.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1674 |
|  | 2.115.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1674 |
|  | 2.115.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1675 |
|  | 2.115.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1675 |
|  | 2.115.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1675 |
|  | 2.115.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1675 |
| 2.116 | fix nph/body command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1675 |
|  | 2.116.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1675 |
|  | 2.116.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1676 |
|  | 2.116.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1676 |
|  | 2.116.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1677 |
|  | 2.116.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1677 |
|  | 2.116.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1677 |
|  | 2.116.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1677 |
| 2.117 | fix nph/sphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1677 |
|  | 2.117.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1677 |
|  | 2.117.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1678 |
|  | 2.117.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1678 |
|  | 2.117.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1679 |
|  | 2.117.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1679 |
|  | 2.117.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1679 |
|  | 2.117.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1679 |
| 2.118 | fix nphug command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1679 |
|  | 2.118.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1680 |
|  | 2.118.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1680 |
|  | 2.118.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1680 |
|  | 2.118.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1682 |
|  | 2.118.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1682 |
|  | 2.118.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1683 |
|  | 2.118.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1683 |
| 2.119 | fix npt/asphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1683 |
|  | 2.119.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1683 |
|  | 2.119.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1683 |
|  | 2.119.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1683 |
|  | 2.119.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1684 |
|  | 2.119.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1685 |
|  | 2.119.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1685 |
|  | 2.119.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1685 |
| 2.120 | fix npt/body command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1685 |
|  | 2.120.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1685 |
|  | 2.120.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1685 |
|  | 2.120.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1686 |
|  | 2.120.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1687 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.120.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1687 |
|  | 2.120.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1687 |
|  | 2.120.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1687 |
| 2.121 | fix npt/cauchy command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1687 |
|  | 2.121.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1687 |
|  | 2.121.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1688 |
|  | 2.121.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1688 |
|  | 2.121.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1693 |
|  | 2.121.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1694 |
|  | 2.121.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1695 |
|  | 2.121.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1695 |
| 2.122 | fix npt/sphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1695 |
|  | 2.122.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1696 |
|  | 2.122.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1696 |
|  | 2.122.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1696 |
|  | 2.122.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1697 |
|  | 2.122.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1698 |
|  | 2.122.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1698 |
|  | 2.122.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1698 |
| 2.123 | fix numdiff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1698 |
|  | 2.123.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1698 |
|  | 2.123.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1698 |
|  | 2.123.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1698 |
|  | 2.123.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1699 |
|  | 2.123.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1699 |
|  | 2.123.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1700 |
|  | 2.123.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1700 |
| 2.124 | fix numdiff/virial command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1700 |
|  | 2.124.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1700 |
|  | 2.124.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1700 |
|  | 2.124.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1700 |
|  | 2.124.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1701 |
|  | 2.124.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1701 |
|  | 2.124.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1701 |
|  | 2.124.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1701 |
| 2.125 | fix nve command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1701 |
|  | 2.125.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1702 |
|  | 2.125.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1702 |
|  | 2.125.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1702 |
|  | 2.125.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1702 |
|  | 2.125.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1702 |
|  | 2.125.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1703 |
|  | 2.125.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1703 |
| 2.126 | fix nve/asphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1703 |
|  | 2.126.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1703 |
|  | 2.126.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1703 |
|  | 2.126.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1703 |
|  | 2.126.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1703 |
|  | 2.126.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1704 |
|  | 2.126.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1704 |
|  | 2.126.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1704 |
| 2.127 | fix nve/asphere/noforce command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1704 |
|  | 2.127.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1704 |
|  | 2.127.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1704 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.127.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1704 |
|  | 2.127.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1705 |
|  | 2.127.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1705 |
|  | 2.127.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1705 |
|  | 2.127.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1705 |
| 2.128 | fix nve/awpmd command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1705 |
|  | 2.128.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1705 |
|  | 2.128.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1705 |
|  | 2.128.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1706 |
|  | 2.128.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1706 |
|  | 2.128.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1706 |
|  | 2.128.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1706 |
|  | 2.128.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1706 |
| 2.129 | fix nve/body command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1706 |
|  | 2.129.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1706 |
|  | 2.129.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1707 |
|  | 2.129.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1707 |
|  | 2.129.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1707 |
|  | 2.129.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1707 |
|  | 2.129.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1707 |
|  | 2.129.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1707 |
| 2.130 | fix nve/bpm/sphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1707 |
|  | 2.130.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1707 |
|  | 2.130.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1708 |
|  | 2.130.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1708 |
|  | 2.130.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1708 |
|  | 2.130.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1708 |
|  | 2.130.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1708 |
|  | 2.130.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1709 |
| 2.131 | fix nve/dot command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1709 |
|  | 2.131.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1709 |
|  | 2.131.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1709 |
|  | 2.131.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1709 |
|  | 2.131.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1709 |
|  | 2.131.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1709 |
|  | 2.131.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1710 |
| 2.132 | fix nve/dotc/langevin command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1710 |
|  | 2.132.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1710 |
|  | 2.132.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1710 |
|  | 2.132.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1710 |
|  | 2.132.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1712 |
|  | 2.132.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1712 |
|  | 2.132.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1712 |
| 2.133 | fix nve/eff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1712 |
|  | 2.133.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1712 |
|  | 2.133.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1712 |
|  | 2.133.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1712 |
|  | 2.133.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1713 |
|  | 2.133.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1713 |
|  | 2.133.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1713 |
|  | 2.133.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1713 |
| 2.134 | fix nve/limit command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1713 |
|  | 2.134.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1713 |
|  | 2.134.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1713 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.134.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1713 |
|  | 2.134.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1714 |
|  | 2.134.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1714 |
|  | 2.134.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1714 |
|  | 2.134.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1714 |
| 2.135 | fix nve/line command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1714 |
|  | 2.135.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1714 |
|  | 2.135.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1715 |
|  | 2.135.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1715 |
|  | 2.135.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1715 |
|  | 2.135.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1715 |
|  | 2.135.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1715 |
|  | 2.135.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1715 |
| 2.136 | fix nve/manifold/rattle command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1715 |
|  | 2.136.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1715 |
|  | 2.136.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1716 |
|  | 2.136.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1716 |
|  | 2.136.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1716 |
|  | 2.136.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1716 |
|  | 2.136.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1717 |
|  | 2.136.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1717 |
| 2.137 | fix nve/noforce command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1717 |
|  | 2.137.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1717 |
|  | 2.137.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1717 |
|  | 2.137.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1717 |
|  | 2.137.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1717 |
|  | 2.137.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1718 |
|  | 2.137.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1718 |
|  | 2.137.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1718 |
| 2.138 | fix nve/sphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1718 |
|  | 2.138.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1718 |
|  | 2.138.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1718 |
|  | 2.138.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1719 |
|  | 2.138.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1719 |
|  | 2.138.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1719 |
|  | 2.138.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1720 |
|  | 2.138.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1720 |
| 2.139 | fix nve/spin command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1720 |
|  | 2.139.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1720 |
|  | 2.139.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1720 |
|  | 2.139.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1720 |
|  | 2.139.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1721 |
|  | 2.139.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1721 |
|  | 2.139.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1721 |
| 2.140 | fix nve/tri command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1722 |
|  | 2.140.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1722 |
|  | 2.140.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1722 |
|  | 2.140.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1722 |
|  | 2.140.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1722 |
|  | 2.140.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1722 |
|  | 2.140.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1722 |
|  | 2.140.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1723 |
| 2.141 | fix nvk command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1723 |
|  | 2.141.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1723 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.141.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1723 |
|  | 2.141.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1723 |
|  | 2.141.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1723 |
|  | 2.141.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1723 |
|  | 2.141.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1724 |
|  | 2.141.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1724 |
| 2.142 | fix nvt/asphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1724 |
|  | 2.142.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1724 |
|  | 2.142.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1724 |
|  | 2.142.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1724 |
|  | 2.142.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1725 |
|  | 2.142.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1726 |
|  | 2.142.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1726 |
|  | 2.142.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1726 |
| 2.143 | fix nvt/body command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1726 |
|  | 2.143.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1726 |
|  | 2.143.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1726 |
|  | 2.143.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1726 |
|  | 2.143.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1727 |
|  | 2.143.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1728 |
|  | 2.143.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1728 |
|  | 2.143.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1728 |
| 2.144 | fix nvt/manifold/rattle command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1728 |
|  | 2.144.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1728 |
|  | 2.144.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1729 |
|  | 2.144.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1729 |
|  | 2.144.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1729 |
|  | 2.144.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1729 |
|  | 2.144.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1729 |
| 2.145 | fix nvt/sllod command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1729 |
|  | 2.145.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1730 |
|  | 2.145.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1730 |
|  | 2.145.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1730 |
|  | 2.145.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1731 |
|  | 2.145.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1732 |
|  | 2.145.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1732 |
|  | 2.145.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1732 |
| 2.146 | fix nvt/sllod/eff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1732 |
|  | 2.146.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1732 |
|  | 2.146.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1733 |
|  | 2.146.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1733 |
|  | 2.146.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1733 |
|  | 2.146.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1733 |
|  | 2.146.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1733 |
|  | 2.146.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1734 |
| 2.147 | fix nvt/sphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1734 |
|  | 2.147.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1734 |
|  | 2.147.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1734 |
|  | 2.147.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1734 |
|  | 2.147.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1735 |
|  | 2.147.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1736 |
|  | 2.147.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1736 |
|  | 2.147.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1736 |
| 2.148 | fix oneway command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1736 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.148.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1736 |
|  | 2.148.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1736 |
|  | 2.148.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1736 |
|  | 2.148.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1737 |
|  | 2.148.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1737 |
|  | 2.148.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1737 |
|  | 2.148.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1737 |
| 2.149 | fix orient/fcc command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1737 |
| 2.150 | fix orient/bcc command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1737 |
|  | 2.150.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1737 |
|  | 2.150.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1738 |
|  | 2.150.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1738 |
|  | 2.150.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1739 |
|  | 2.150.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1740 |
|  | 2.150.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1740 |
|  | 2.150.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1740 |
| 2.151 | fix orient/eco command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1740 |
|  | 2.151.1 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1741 |
|  | 2.151.2 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1741 |
|  | 2.151.3 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1742 |
|  | 2.151.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1742 |
|  | 2.151.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1742 |
|  | 2.151.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1742 |
| 2.152 | fix pafi command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1743 |
|  | 2.152.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1743 |
|  | 2.152.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1743 |
|  | 2.152.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1743 |
|  | 2.152.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1744 |
|  | 2.152.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1744 |
|  | 2.152.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1744 |
| 2.153 | fix pair command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1744 |
|  | 2.153.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1744 |
|  | 2.153.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1745 |
|  | 2.153.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1745 |
|  | 2.153.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1746 |
|  | 2.153.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1746 |
|  | 2.153.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1746 |
|  | 2.153.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1746 |
| 2.154 | fix phonon command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1746 |
|  | 2.154.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1746 |
|  | 2.154.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1747 |
|  | 2.154.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1747 |
|  | 2.154.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1748 |
|  | 2.154.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1748 |
|  | 2.154.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1748 |
|  | 2.154.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1748 |
| 2.155 | fix pimd/langevin command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1749 |
| 2.156 | fix pimd/nvt command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1749 |
|  | 2.156.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1749 |
|  | 2.156.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1750 |
|  | 2.156.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1750 |
|  | 2.156.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1754 |
|  | 2.156.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1756 |
|  | 2.156.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1756 |

* 1. fix planeforce command 1757
     1. Syntax 1757
     2. Examples 1757
     3. Description 1757
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1757
     5. Restrictions 1757
     6. Related commands 1757
     7. Default 1757
  2. fix plumed command 1758
     1. Syntax 1758
     2. Examples 1758
     3. Description 1758
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1759
     5. Restrictions 1759
     6. Related commands 1759
     7. Default 1759
  3. fix poems command 1759
     1. Syntax 1759
     2. Examples 1760
     3. Description 1760
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1761
     5. Restrictions 1761
     6. Related commands 1761
     7. Default 1761
  4. fix polarize/bem/gmres command 1761
  5. fix polarize/bem/icc command 1761
  6. fix polarize/functional command 1761
     1. Syntax 1761
     2. Examples 1762
     3. Description 1762
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1763
     5. Restrictions 1764
     6. Related commands 1764
     7. Default 1764
  7. fix pour command 1765
     1. Syntax 1765
     2. Examples 1766
     3. Description 1766
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1768
     5. Restrictions 1768
     6. Related commands 1768
     7. Default 1768
  8. fix precession/spin command 1768
     1. Syntax 1768
     2. Examples 1769
     3. Description 1769
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1771
     5. Restrictions 1771
     6. Related commands 1771
     7. Default 1771
  9. fix press/berendsen command 1771
     1. Syntax 1771
     2. Examples 1772
     3. Description 1772

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.165.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1774 |
| 2.165.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1774 |
| 2.165.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1774 |
| 2.165.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1774 |
| 2.166 | fix press/langevin command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1775 |
|  | 2.166.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1775 |
|  | 2.166.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1775 |
|  | 2.166.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1775 |
|  | 2.166.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1778 |
|  | 2.166.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1779 |
|  | 2.166.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1779 |
|  | 2.166.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1779 |
| 2.167 | fix print command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1779 |
|  | 2.167.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1779 |
|  | 2.167.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1779 |
|  | 2.167.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1780 |
|  | 2.167.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1781 |
|  | 2.167.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1781 |
|  | 2.167.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1781 |
|  | 2.167.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1781 |
| 2.168 | fix propel/self command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1781 |
|  | 2.168.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1781 |
|  | 2.168.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1781 |
|  | 2.168.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1782 |
|  | 2.168.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1783 |
|  | 2.168.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1783 |
|  | 2.168.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1783 |
|  | 2.168.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1783 |
| 2.169 | fix property/atom command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1783 |
|  | 2.169.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1783 |
|  | 2.169.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1784 |
|  | 2.169.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1784 |
|  | 2.169.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1787 |
|  | 2.169.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1788 |
|  | 2.169.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1788 |
|  | 2.169.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1788 |
| 2.170 | fix python/invoke command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1788 |
|  | 2.170.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1788 |
|  | 2.170.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1788 |
|  | 2.170.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1789 |
|  | 2.170.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1789 |
|  | 2.170.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1789 |
| 2.171 | fix python/move command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1789 |
|  | 2.171.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1789 |
|  | 2.171.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1789 |
|  | 2.171.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1790 |
|  | 2.171.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1791 |
|  | 2.171.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1791 |
|  | 2.171.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1791 |
|  | 2.171.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1791 |
| 2.172 | fix qbmsst command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1791 |
|  | 2.172.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1791 |
|  | 2.172.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1792 |
|  | 2.172.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1793 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.172.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1793 |
|  | 2.172.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1794 |
|  | 2.172.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1795 |
|  | 2.172.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1795 |
| 2.173 | fix qeq/point command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1795 |
| 2.174 | fix qeq/shielded command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1795 |
| 2.175 | fix qeq/slater command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1795 |
| 2.176 | fix qeq/dynamic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1795 |
| 2.177 | fix qeq/fire command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1795 |
|  | 2.177.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1795 |
|  | 2.177.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1796 |
|  | 2.177.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1796 |
|  | 2.177.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1798 |
|  | 2.177.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1798 |
|  | 2.177.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1798 |
|  | 2.177.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1798 |
| 2.178 | fix qeq/comb command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1799 |
|  | 2.178.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1799 |
|  | 2.178.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1799 |
|  | 2.178.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1799 |
|  | 2.178.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1800 |
|  | 2.178.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1800 |
|  | 2.178.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1800 |
|  | 2.178.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1800 |
| 2.179 | fix qeq/reaxff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1801 |
|  | 2.179.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1801 |
|  | 2.179.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1801 |
|  | 2.179.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1801 |
|  | 2.179.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1802 |
|  | 2.179.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1802 |
|  | 2.179.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1803 |
|  | 2.179.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1803 |
| 2.180 | fix qmmm command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1803 |
|  | 2.180.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1803 |
|  | 2.180.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1803 |
|  | 2.180.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1803 |
|  | 2.180.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1804 |
|  | 2.180.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1804 |
|  | 2.180.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1804 |
|  | 2.180.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1804 |
| 2.181 | fix qtb command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1804 |
|  | 2.181.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1804 |
|  | 2.181.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1805 |
|  | 2.181.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1805 |
|  | 2.181.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1806 |
|  | 2.181.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1806 |
|  | 2.181.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1806 |
|  | 2.181.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1806 |
| 2.182 | fix reaxff/bonds command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1807 |
|  | 2.182.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1807 |
|  | 2.182.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1807 |
|  | 2.182.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1807 |
|  | 2.182.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1808 |
|  | 2.182.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1808 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.182.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1808 |
|  | 2.182.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1808 |
| 2.183 | fix reaxff/species command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1808 |
|  | 2.183.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1808 |
|  | 2.183.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1809 |
|  | 2.183.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1809 |
|  | 2.183.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1811 |
|  | 2.183.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1811 |
|  | 2.183.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1811 |
|  | 2.183.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1812 |
| 2.184 | fix recenter command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1812 |
|  | 2.184.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1812 |
|  | 2.184.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1812 |
|  | 2.184.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1812 |
|  | 2.184.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1813 |
|  | 2.184.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1813 |
|  | 2.184.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1814 |
|  | 2.184.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1814 |
| 2.185 | fix restrain command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1814 |
|  | 2.185.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1814 |
|  | 2.185.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1815 |
|  | 2.185.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1815 |
|  | 2.185.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1817 |
|  | 2.185.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1818 |
|  | 2.185.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1818 |
|  | 2.185.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1818 |
| 2.186 | fix rheo command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1818 |
|  | 2.186.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1818 |
|  | 2.186.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1819 |
|  | 2.186.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1819 |
|  | 2.186.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1820 |
|  | 2.186.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1820 |
|  | 2.186.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1820 |
|  | 2.186.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1820 |
| 2.187 | fix rheo/oxidation command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1820 |
|  | 2.187.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1820 |
|  | 2.187.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1821 |
|  | 2.187.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1821 |
|  | 2.187.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1821 |
|  | 2.187.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1821 |
|  | 2.187.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1821 |
|  | 2.187.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1821 |
| 2.188 | fix rheo/pressure command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1822 |
|  | 2.188.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1822 |
|  | 2.188.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1822 |
|  | 2.188.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1822 |
|  | 2.188.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1823 |
|  | 2.188.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1823 |
|  | 2.188.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1823 |
|  | 2.188.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1823 |
| 2.189 | fix rheo/thermal command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1823 |
|  | 2.189.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1823 |
|  | 2.189.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1824 |
|  | 2.189.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1824 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.189.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1824 |
|  | 2.189.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1825 |
|  | 2.189.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1825 |
|  | 2.189.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1825 |
| 2.190 | fix rheo/viscosity command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1825 |
|  | 2.190.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1825 |
|  | 2.190.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1825 |
|  | 2.190.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1826 |
|  | 2.190.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1826 |
|  | 2.190.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1826 |
|  | 2.190.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1826 |
|  | 2.190.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1827 |
| 2.191 | fix rhok command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1827 |
|  | 2.191.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1827 |
|  | 2.191.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1827 |
|  | 2.191.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1827 |
|  | 2.191.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1828 |
|  | 2.191.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1828 |
|  | 2.191.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1828 |
|  | 2.191.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1828 |
| 2.192 | fix rigid command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1828 |
| 2.193 | fix rigid/nve command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1828 |
| 2.194 | fix rigid/nvt command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1828 |
| 2.195 | fix rigid/npt command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1829 |
| 2.196 | fix rigid/nph command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1829 |
| 2.197 | fix rigid/small command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1829 |
| 2.198 | fix rigid/nve/small command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1829 |
| 2.199 | fix rigid/nvt/small command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1829 |
| 2.200 | fix rigid/npt/small command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1829 |
| 2.201 | fix rigid/nph/small command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1829 |
|  | 2.201.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1829 |
|  | 2.201.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1830 |
|  | 2.201.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1831 |
|  | 2.201.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1839 |
|  | 2.201.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1840 |
|  | 2.201.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1840 |
|  | 2.201.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1840 |
| 2.202 | fix rigid/meso command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1840 |
|  | 2.202.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1840 |
|  | 2.202.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1841 |
|  | 2.202.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1841 |
|  | 2.202.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1844 |
|  | 2.202.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1845 |
|  | 2.202.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1845 |
|  | 2.202.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1845 |
| 2.203 | fix rx command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1845 |
|  | 2.203.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1845 |
|  | 2.203.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1846 |
|  | 2.203.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1846 |
|  | 2.203.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1848 |
|  | 2.203.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1849 |
|  | 2.203.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1849 |
| 2.204 | fix saed/vtk command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1849 |
|  | 2.204.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1849 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.204.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1849 |
|  | 2.204.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1850 |
|  | 2.204.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1851 |
|  | 2.204.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1851 |
|  | 2.204.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1851 |
|  | 2.204.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1851 |
| 2.205 | fix setforce command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1852 |
| 2.206 | fix setforce/spin command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1852 |
|  | 2.206.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1852 |
|  | 2.206.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1852 |
|  | 2.206.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1852 |
|  | 2.206.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1853 |
|  | 2.206.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1854 |
|  | 2.206.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1854 |
|  | 2.206.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1854 |
| 2.207 | fix sgcmc command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1854 |
|  | 2.207.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1854 |
|  | 2.207.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1855 |
|  | 2.207.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1855 |
|  | 2.207.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1856 |
|  | 2.207.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1856 |
|  | 2.207.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1856 |
| 2.208 | fix shake command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1857 |
| 2.209 | fix rattle command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1857 |
|  | 2.209.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1857 |
|  | 2.209.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1857 |
|  | 2.209.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1858 |
|  | 2.209.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1860 |
|  | 2.209.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1860 |
|  | 2.209.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1861 |
|  | 2.209.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1861 |
| 2.210 | fix shardlow command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1861 |
|  | 2.210.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1861 |
|  | 2.210.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1861 |
|  | 2.210.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1861 |
|  | 2.210.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1862 |
|  | 2.210.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1862 |
|  | 2.210.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1862 |
| 2.211 | fix smd command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1862 |
|  | 2.211.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1862 |
|  | 2.211.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1863 |
|  | 2.211.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1863 |
|  | 2.211.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1864 |
|  | 2.211.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1864 |
|  | 2.211.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1864 |
|  | 2.211.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1864 |
| 2.212 | fix smd/adjust\_dt command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1865 |
|  | 2.212.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1865 |
|  | 2.212.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1865 |
|  | 2.212.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1865 |
|  | 2.212.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1865 |
|  | 2.212.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1865 |
|  | 2.212.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1865 |
|  | 2.212.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1866 |

* 1. fix smd/integrate\_tlsph command 1866
     1. Syntax 1866
     2. Examples 1866
     3. Description 1866
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1866
     5. Restrictions 1866
     6. Related commands 1867
     7. Default 1867
  2. fix smd/integrate\_ulsph command 1867
     1. Syntax 1867
     2. Examples 1867
     3. Description 1867
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1868
     5. Restrictions 1868
     6. Related commands 1868
     7. Default 1868
  3. fix smd/move\_tri\_surf command 1868
     1. Syntax 1868
     2. Examples 1869
     3. Description 1869
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1869
     5. Restrictions 1869
     6. Related commands 1869
     7. Default 1869
  4. fix smd/setvel command 1870
     1. Syntax 1870
     2. Examples 1870
     3. Description 1870
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1871
     5. Restrictions 1871
     6. Related commands 1871
     7. Default 1871
  5. fix smd/wall\_surface command 1871
     1. Syntax 1871
     2. Examples 1871
     3. Description 1872
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1872
     5. Restrictions 1872
     6. Related commands 1872
     7. Default 1872
  6. fix sph command 1872
     1. Syntax 1872
     2. Examples 1873
     3. Description 1873
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1873
     5. Restrictions 1873
     6. Related commands 1873
     7. Default 1873
  7. fix sph/stationary command 1873
     1. Syntax 1873
     2. Examples 1874
     3. Description 1874
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1874
     5. Restrictions 1874
     6. Related commands 1874
     7. Default 1874
  8. fix spring command 1874
     1. Syntax 1874
     2. Examples 1875
     3. Description 1875
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1876
     5. Restrictions 1876
     6. Related commands 1876
     7. Default 1876
  9. fix spring/chunk command 1876
     1. Syntax 1876
     2. Examples 1877
     3. Description 1877
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1877
     5. Restrictions 1878
     6. Related commands 1878
     7. Default 1878
  10. fix spring/rg command 1878
      1. Syntax 1878
      2. Examples 1878
      3. Description 1878
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1879
      5. Restrictions 1879
      6. Related commands 1879
      7. Default 1879
  11. fix spring/self command 1879
      1. Syntax 1879
      2. Examples 1880
      3. Description 1880
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1880
      5. Restrictions 1881
      6. Related commands 1881
      7. Default 1881
  12. fix srd command 1881
      1. Syntax 1881
      2. Examples 1882
      3. Description 1882
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1885
      5. Restrictions 1886
      6. Related commands 1886
      7. Default 1886
  13. fix store/force command 1886
      1. Syntax 1886
      2. Examples 1886
      3. Description 1887
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1887
      5. Restrictions 1887
      6. Related commands 1887
      7. Default 1887
  14. fix store/state command 1888
      1. Syntax 1888
      2. Examples 1889
      3. Description 1889

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.226.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1889 |
| 2.226.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1890 |
| 2.226.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1890 |
| 2.226.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1890 |
| 2.227 | fix temp/berendsen command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1890 |
|  | 2.227.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1890 |
|  | 2.227.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1890 |
|  | 2.227.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1890 |
|  | 2.227.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1892 |
|  | 2.227.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1892 |
|  | 2.227.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1892 |
|  | 2.227.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1892 |
| 2.228 | fix temp/csvr command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1893 |
| 2.229 | fix temp/csld command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1893 |
|  | 2.229.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1893 |
|  | 2.229.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1893 |
|  | 2.229.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1893 |
|  | 2.229.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1894 |
|  | 2.229.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1895 |
|  | 2.229.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1895 |
|  | 2.229.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1895 |
| 2.230 | fix temp/rescale command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1895 |
|  | 2.230.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1895 |
|  | 2.230.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1896 |
|  | 2.230.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1896 |
|  | 2.230.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1897 |
|  | 2.230.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1898 |
|  | 2.230.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1898 |
|  | 2.230.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1898 |
| 2.231 | fix temp/rescale/eff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1898 |
|  | 2.231.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1898 |
|  | 2.231.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1898 |
|  | 2.231.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1898 |
|  | 2.231.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1899 |
|  | 2.231.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1899 |
|  | 2.231.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1899 |
|  | 2.231.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1899 |
| 2.232 | fix tfmc command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1899 |
|  | 2.232.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1899 |
|  | 2.232.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1900 |
|  | 2.232.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1900 |
|  | 2.232.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1901 |
|  | 2.232.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1901 |
|  | 2.232.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1901 |
|  | 2.232.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1901 |
| 2.233 | fix tgnvt/drude command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1901 |
| 2.234 | fix tgnpt/drude command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1901 |
|  | 2.234.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1901 |
|  | 2.234.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1902 |
|  | 2.234.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1902 |
|  | 2.234.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1904 |
|  | 2.234.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1905 |
|  | 2.234.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1905 |
|  | 2.234.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1906 |

* 1. fix thermal/conductivity command 1906
     1. Syntax 1906
     2. Examples 1906
     3. Description 1906
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1907
     5. Restrictions 1908
     6. Related commands 1908
     7. Default 1908
  2. fix ti/spring command 1908
     1. Syntax 1908
     2. Example 1909
     3. Description 1909
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1910
     5. Related commands 1910
     6. Restrictions 1910
     7. Default 1910
  3. fix tmd command 1911
     1. Syntax 1911
     2. Examples 1911
     3. Description 1911
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1912
     5. Restrictions 1912
     6. Related commands 1912
     7. Default 1912
  4. fix ttm command 1913
  5. fix ttm/grid command 1913
  6. fix ttm/mod command 1913
     1. Syntax 1913
     2. Examples 1914
     3. Description 1914
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1917
     5. Restrictions 1918
     6. Related commands 1918
     7. Default 1918
  7. fix tune/kspace command 1918
     1. Syntax 1918
     2. Examples 1919
     3. Description 1919
     4. Restrictions 1919
     5. Related commands 1920
     6. Default 1920
  8. fix vector command 1920
     1. Syntax 1920
     2. Examples 1920
     3. Description 1920
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1922
     5. Restrictions 1922
     6. Related commands 1922
     7. Defaults 1922
  9. fix viscosity command 1922
     1. Syntax 1922
     2. Examples 1923
     3. Description 1923
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1924
     5. Restrictions 1924
     6. Related commands 1925
     7. Default 1925
  10. fix viscous command 1925
      1. Syntax 1925
      2. Examples 1925
      3. Description 1925
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1926
      5. Restrictions 1927
      6. Related commands 1927
      7. Default 1927
  11. fix viscous/sphere command 1927
      1. Syntax 1927
      2. Examples 1927
      3. Description 1927
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1928
      5. Restrictions 1928
      6. Related commands 1928
      7. Default 1928
  12. fix wall/lj93 command 1929
  13. fix wall/lj126 command 1929
  14. fix wall/lj1043 command 1929
  15. fix wall/colloid command 1929
  16. fix wall/harmonic command 1929
  17. fix wall/lepton command 1929
  18. fix wall/morse command 1929
  19. fix wall/table command 1929
      1. Syntax 1929
      2. Examples 1931
      3. Description 1931
      4. Lepton expression syntax and features 1934
      5. Table file format 1935
      6. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1936
      7. Restrictions 1937
      8. Related commands 1937
      9. Default 1937
  20. fix wall/body/polygon command 1937
      1. Syntax 1937
      2. Examples 1938
      3. Description 1938
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1938
      5. Restrictions 1938
      6. Related commands 1939
      7. Default 1939
  21. fix wall/body/polyhedron command 1939
      1. Syntax 1939
      2. Examples 1939
      3. Description 1940
      4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1940
      5. Restrictions 1940
      6. Related commands 1940
      7. Default 1941
  22. fix wall/ees command 1941
  23. fix wall/region/ees command 1941

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2.257.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1941 |
| 2.257.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1941 |
| 2.257.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1942 |
| 2.257.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1943 |
| 2.257.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1943 |
| 2.257.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1943 |
| 2.257.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1943 |
| 2.258 | fix wall/flow command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1944 |
|  | 2.258.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1944 |
|  | 2.258.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1944 |
|  | 2.258.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1944 |
|  | 2.258.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1945 |
|  | 2.258.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1945 |
|  | 2.258.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1946 |
|  | 2.258.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1946 |
| 2.259 | fix wall/gran command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1946 |
|  | 2.259.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1946 |
|  | 2.259.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1947 |
|  | 2.259.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1947 |
|  | 2.259.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1949 |
|  | 2.259.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1949 |
|  | 2.259.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1950 |
|  | 2.259.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1950 |
| 2.260 | fix wall/gran/region command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1950 |
|  | 2.260.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1950 |
|  | 2.260.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1951 |
|  | 2.260.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1951 |
|  | 2.260.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1953 |
|  | 2.260.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1954 |
|  | 2.260.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1954 |
|  | 2.260.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1954 |
| 2.261 | fix wall/piston command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1954 |
|  | 2.261.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1954 |
|  | 2.261.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1955 |
|  | 2.261.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1955 |
|  | 2.261.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1955 |
|  | 2.261.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1956 |
|  | 2.261.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1956 |
|  | 2.261.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1956 |
| 2.262 | fix wall/reflect command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1956 |
|  | 2.262.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1956 |
|  | 2.262.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1957 |
|  | 2.262.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1957 |
|  | 2.262.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1958 |
|  | 2.262.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1958 |
|  | 2.262.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1958 |
|  | 2.262.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1959 |
| 2.263 | fix wall/reflect/stochastic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1959 |
|  | 2.263.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1959 |
|  | 2.263.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1959 |
|  | 2.263.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1960 |
|  | 2.263.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1960 |
|  | 2.263.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1960 |
|  | 2.263.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1961 |

* 1. fix wall/region command 1961
     1. Syntax 1961
     2. Examples 1961
     3. Description 1961
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1963
     5. Restrictions 1964
     6. Related commands 1964
     7. Default 1964
  2. fix wall/srd command 1964
     1. Syntax 1964
     2. Examples 1965
     3. Description 1965
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 1967
     5. Restrictions 1967
     6. Related commands 1967
     7. Default 1967

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 2.266 | | fix widom | command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1967 |
|  | | 2.266.1 | Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1967 |
|  | | 2.266.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1968 |
|  | | 2.266.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1968 |
|  | | 2.266.4 | Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1969 |
|  | | 2.266.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1970 |
|  | | 2.266.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1970 |
|  | | 2.266.7 | Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 1970 |
| **3** | **Computes** | | | **1971** |
|  | 3.1 compute ackland/atom command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1971 |
|  | 3.1.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1971 |
|  | 3.1.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1971 |
|  | 3.1.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1971 |
|  | 3.1.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1972 |
|  | 3.1.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1972 |
|  | 3.1.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1972 |
|  | 3.1.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1972 |
|  | 3.2 compute adf command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1972 |
|  | 3.2.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1972 |
|  | 3.2.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1973 |
|  | 3.2.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1973 |
|  | 3.2.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1975 |
|  | 3.2.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1975 |
|  | 3.2.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1975 |
|  | 3.2.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1975 |
|  | 3.3 compute angle command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1976 |
|  | 3.3.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1976 |
|  | 3.3.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1976 |
|  | 3.3.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1976 |
|  | 3.3.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1976 |
|  | 3.3.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1976 |
|  | 3.3.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1976 |
|  | 3.3.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1977 |
|  | 3.4 compute angle/local command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1977 |
|  | 3.4.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1977 |
|  | 3.4.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1977 |
|  | 3.4.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 1977 |

* + 1. Output info 1978
    2. Restrictions 1979
    3. Related commands 1979
    4. Default 1979
  1. compute angmom/chunk command 1979
     1. Syntax 1979
     2. Examples 1979
     3. Description 1979
     4. Output info 1980
     5. Restrictions 1980
     6. Related commands 1980
     7. Default 1980
  2. compute ave/sphere/atom command 1980
     1. Syntax 1981
     2. Examples 1981
     3. Description 1981
     4. Output info 1982
     5. Restrictions 1982
     6. Related commands 1982
     7. Default 1982
  3. compute basal/atom command 1982
     1. Syntax 1982
     2. Examples 1983
     3. Description 1983
     4. Output info 1983
     5. Restrictions 1983
     6. Related commands 1983
     7. Default 1983
  4. compute body/local command 1984
     1. Syntax 1984
     2. Examples 1984
     3. Description 1984
     4. Output info 1985
     5. Restrictions 1985
     6. Related commands 1985
     7. Default 1985
  5. compute bond command 1985
     1. Syntax 1985
     2. Examples 1985
     3. Description 1985
     4. Output info 1986
     5. Restrictions 1986
     6. Related commands 1986
     7. Default 1986
  6. compute bond/local command 1986
     1. Syntax 1986
     2. Examples 1987
     3. Description 1987
     4. Output info 1989
     5. Restrictions 1989
     6. Related commands 1989
     7. Default 1989
  7. compute born/matrix command 1989
     1. Syntax 1989
     2. Examples 1990
     3. Description 1990
     4. Restrictions 1992
     5. Default 1992
  8. compute centro/atom command 1992
     1. Syntax 1992
     2. Examples 1993
     3. Description 1993
     4. Output info 1994
     5. Restrictions 1994
     6. Related commands 1994
     7. Default 1994
  9. compute chunk/atom command 1995
     1. Syntax 1995
     2. Examples 1996
     3. Description 1996
     4. Output info 2002
     5. Restrictions 2002
     6. Related commands 2003
     7. Default 2003
  10. compute chunk/spread/atom command 2003
      1. Syntax 2003
      2. Examples 2004
      3. Description 2004
      4. Output info 2006
      5. Restrictions 2006
      6. Related commands 2006
      7. Default 2006
  11. compute cluster/atom command 2006
  12. compute fragment/atom command 2006
  13. compute aggregate/atom command 2006
      1. Syntax 2006
      2. Examples 2007
      3. Description 2007
      4. Output info 2008
      5. Restrictions 2008
      6. Related commands 2008
      7. Default 2008
  14. compute cna/atom command 2008
      1. Syntax 2008
      2. Examples 2008
      3. Description 2008
      4. Output info 2009
      5. Restrictions 2009
      6. Related commands 2009
      7. Default 2010
  15. compute cnp/atom command 2010
      1. Syntax 2010
      2. Examples 2010
      3. Description 2010
      4. Output info 2011
      5. Restrictions 2011
      6. Related commands 2012
      7. Default 2012
  16. compute com command 2012
      1. Syntax 2012
      2. Examples 2012
      3. Description 2012
      4. Output info 2013
      5. Restrictions 2013
      6. Related commands 2013
      7. Default 2013
  17. compute com/chunk command 2013
      1. Syntax 2013
      2. Examples 2013
      3. Description 2013
      4. Output info 2014
      5. Restrictions 2014
      6. Related commands 2014
      7. Default 2014
  18. compute composition/atom command 2014
      1. Syntax 2015
      2. Examples 2015
      3. Description 2015
      4. Output info 2016
      5. Restrictions 2016
      6. Related commands 2016
      7. Default 2016
  19. compute contact/atom command 2016
      1. Syntax 2016
      2. Examples 2017
      3. Description 2017
      4. Output info 2017
      5. Restrictions 2017
      6. Related commands 2017
      7. Default 2017
  20. compute coord/atom command 2017
      1. Syntax 2018
      2. Examples 2018
      3. Description 2018
      4. Output info 2019
      5. Restrictions 2020
      6. Related commands 2020
      7. Default 2020
  21. compute count/type command 2020
      1. Syntax 2020
      2. Examples 2020
      3. Description 2020
      4. Output info 2021
      5. Restrictions 2022
      6. Related commands 2022
      7. Default 2022
  22. compute damage/atom command 2022
      1. Syntax 2022
      2. Examples 2022
      3. Description 2022
      4. Output info 2023
      5. Restrictions 2023
      6. Related commands 2023
      7. Default 2023
  23. compute dihedral command 2023
      1. Syntax 2023
      2. Examples 2023
      3. Description 2023
      4. Output info 2024
      5. Restrictions 2024
      6. Related commands 2024
      7. Default 2024
  24. compute dihedral/local command 2024
      1. Syntax 2024
      2. Examples 2025
      3. Description 2025
      4. Output info 2026
      5. Restrictions 2026
      6. Related commands 2026
      7. Default 2026
  25. compute dilatation/atom command 2026
      1. Syntax 2026
      2. Examples 2026
      3. Description 2026
      4. Output info 2027
      5. Restrictions 2027
      6. Related commands 2027
      7. Default 2027
  26. compute dipole command 2027
  27. compute dipole/tip4p command 2027
      1. Syntax 2027
      2. Examples 2027
      3. Description 2028
      4. Output info 2028
      5. Restrictions 2028
      6. Related commands 2028
      7. Default 2028
  28. compute dipole/chunk command 2029
  29. compute dipole/tip4p/chunk command 2029
      1. Syntax 2029
      2. Examples 2029
      3. Description 2029
      4. Output info 2030
      5. Restrictions 2030
      6. Related commands 2030
      7. Default 2030
  30. compute displace/atom command 2030
      1. Syntax 2030
      2. Examples 2031
      3. Description 2031
      4. Output info 2032
      5. Restrictions 2032
      6. Related commands 2032
      7. Default 2032
  31. compute dpd command 2033
      1. Syntax 2033
      2. Examples 2033
      3. Description 2033
      4. Output info 2033
      5. Restrictions 2034
      6. Related commands 2034
      7. Default 2034
  32. compute dpd/atom command 2034
      1. Syntax 2034
      2. Examples 2034
      3. Description 2034
      4. Output info 2035
      5. Restrictions 2035
      6. Related commands 2035
      7. Default 2035
  33. compute edpd/temp/atom command 2035
      1. Syntax 2035
      2. Examples 2035
      3. Description 2036
      4. Output info 2036
      5. Restrictions 2036
      6. Related commands 2036
      7. Default 2036
  34. compute efield/atom command 2036
      1. Syntax 2036
      2. Examples 2037
      3. Description 2037
      4. Output info 2037
      5. Restrictions 2037
      6. Related commands 2037
      7. Default 2037
  35. compute efield/wolf/atom command 2038
      1. Syntax 2038
      2. Examples 2038
      3. Description 2038
      4. Output info 2039
      5. Restrictions 2039
      6. Related commands 2039
      7. Default 2039
  36. compute entropy/atom command 2039
      1. Syntax 2039
      2. Examples 2040
      3. Description 2040
      4. Output info 2041
      5. Restrictions 2041
      6. Related commands 2041
      7. Default 2041
  37. compute erotate/asphere command 2041
      1. Syntax 2041
      2. Examples 2042
      3. Description 2042
      4. Output info 2042
      5. Restrictions 2042
      6. Related commands 2042
      7. Default 2043
  38. compute erotate/rigid command 2043
      1. Syntax 2043
      2. Examples 2043
      3. Description 2043
      4. Output info 2043
      5. Restrictions 2043
      6. Related commands 2044
      7. Default 2044
  39. compute erotate/sphere command 2044
      1. Syntax 2044
      2. Examples 2044
      3. Description 2044
      4. Output info 2045
      5. Restrictions 2045
      6. Related commands 2045
      7. Default 2045
  40. compute erotate/sphere/atom command 2045
      1. Syntax 2045
      2. Examples 2045
      3. Description 2046
      4. Output info 2046
      5. Restrictions 2046
      6. Related commands 2046
      7. Default 2046
  41. compute event/displace command 2046
      1. Syntax 2046
      2. Examples 2047
      3. Description 2047
      4. Output info 2047
      5. Restrictions 2047
      6. Related commands 2047
      7. Default 2047
  42. compute fabric command 2048
      1. Syntax 2048
      2. Examples 2048
      3. Description 2048
      4. Output info 2049
      5. Restrictions 2050
      6. Related commands 2050
      7. Default 2050
  43. compute fep command 2050
      1. Syntax 2050
      2. Examples 2051
      3. Description 2051
      4. Output info 2053
      5. Restrictions 2054
      6. Related commands 2054
      7. Default 2054
  44. compute fep/ta command 2054
      1. Syntax 2054
      2. Examples 2055
      3. Description 2055
      4. Output info 2055
      5. Restrictions 2055
      6. Related commands 2055
      7. Default 2056
  45. compute global/atom command 2056
      1. Syntax 2056
      2. Examples 2056
      3. Description 2056
      4. Output info 2058
      5. Restrictions 2059
      6. Related commands 2059
      7. Default 2059
  46. compute group/group command 2059
      1. Syntax 2059
      2. Examples 2059
      3. Description 2059
      4. Output info 2061
      5. Restrictions 2061
      6. Related commands 2061
      7. Default 2061
  47. compute gyration command 2061
      1. Syntax 2061
      2. Examples 2061
      3. Description 2062
      4. Output info 2062
      5. Restrictions 2062
      6. Related commands 2062
      7. Default 2063
  48. compute gyration/chunk command 2063
      1. Syntax 2063
      2. Examples 2063
      3. Description 2063
      4. Output info 2064
      5. Restrictions 2064
      6. Related commands 2064
      7. Default 2064
  49. compute gyration/shape command 2065
      1. Syntax 2065
      2. Examples 2065
      3. Description 2065
      4. Output info 2066
      5. Restrictions 2066
      6. Related commands 2066
      7. Default 2066
  50. compute gyration/shape/chunk command 2066
      1. Syntax 2066
      2. Examples 2066
      3. Description 2067
      4. Output info 2067
      5. Restrictions 2068
      6. Related commands 2068
      7. Default 2068
  51. compute heat/flux command 2068
      1. Syntax 2068
      2. Examples 2068
      3. Description 2068
      4. Output info 2070
      5. Restrictions 2070
      6. Related commands 2070
      7. Default 2070
  52. compute hexorder/atom command 2072
      1. Syntax 2072
      2. Examples 2072
      3. Description 2072
      4. Output info 2073
      5. Restrictions 2073
      6. Related commands 2073
      7. Default 2073
  53. compute hma command 2074
      1. Syntax 2074
      2. Examples 2074
      3. Description 2074
      4. Output info 2076
      5. Restrictions 2076
      6. Related commands 2076
      7. Default 2076
  54. compute improper command 2076
      1. Syntax 2076
      2. Examples 2077
      3. Description 2077
      4. Output info 2077
      5. Restrictions 2077
      6. Related commands 2077
      7. Default 2077
  55. compute improper/local command 2077
      1. Syntax 2077
      2. Examples 2078
      3. Description 2078
      4. Output info 2078
      5. Restrictions 2078
      6. Related commands 2078
      7. Default 2079
  56. compute inertia/chunk command 2079
      1. Syntax 2079
      2. Examples 2079
      3. Description 2079
      4. Output info 2080
      5. Restrictions 2080
      6. Related commands 2080
      7. Default 2080
  57. compute ke command 2080
      1. Syntax 2080
      2. Examples 2080
      3. Description 2080
      4. Output info 2081
      5. Restrictions 2081
      6. Related commands 2081
      7. Default 2081
  58. compute ke/atom command 2081
      1. Syntax 2081
      2. Examples 2081
      3. Description 2081
      4. Output info 2082
      5. Restrictions 2082
      6. Related commands 2082
      7. Default 2082
  59. compute ke/atom/eff command 2082
      1. Syntax 2082
      2. Examples 2082
      3. Description 2082
      4. Output info 2083
      5. Restrictions 2083
      6. Related commands 2083
      7. Default 2083
  60. compute ke/eff command 2083
      1. Syntax 2083
      2. Examples 2084
      3. Description 2084
      4. Output info 2084
      5. Restrictions 2084
      6. Related commands 2085
      7. Default 2085
  61. compute ke/rigid command 2085
      1. Syntax 2085
      2. Examples 2085
      3. Description 2085
      4. Output info 2085
      5. Restrictions 2086
      6. Related commands 2086
      7. Default 2086
  62. compute mliap command 2086
      1. Syntax 2086
      2. Examples 2086
      3. Description 2086
      4. Output info 2088
      5. Restrictions 2088
      6. Related commands 2088
      7. Default 2088
  63. compute momentum command 2089
      1. Syntax 2089
      2. Examples 2089
      3. Description 2089
      4. Output info 2089
      5. Restrictions 2089
      6. Related commands 2089
      7. Default 2089
  64. compute msd command 2090
      1. Syntax 2090
      2. Examples 2090
      3. Description 2090
      4. Output info 2091
      5. Restrictions 2091
      6. Related commands 2091
      7. Default 2091
  65. compute msd/chunk command 2091
      1. Syntax 2091
      2. Examples 2092
      3. Description 2092
      4. Output info 2093
      5. Restrictions 2093
      6. Related commands 2093
      7. Default 2093
  66. compute msd/nongauss command 2093
      1. Syntax 2093
      2. Examples 2094
      3. Description 2094
      4. Output info 2094
      5. Restrictions 2094
      6. Related commands 2094
      7. Default 2095
  67. compute nbond/atom command 2095
      1. Syntax 2095
      2. Examples 2095
      3. Description 2095
      4. Output info 2095
      5. Restrictions 2096
      6. Related commands 2096
      7. Default 2096
  68. compute omega/chunk command 2096
      1. Syntax 2096
      2. Examples 2096
      3. Description 2096
      4. Output info 2097
      5. Restrictions 2097
      6. Related commands 2097
      7. Default 2097
  69. compute orientorder/atom command 2097
      1. Syntax 2097
      2. Examples 2098
      3. Description 2098
      4. Output info 2100
      5. Restrictions 2100
      6. Related commands 2100
      7. Default 2100
  70. compute pace command 2100
      1. Syntax 2100
      2. Examples 2101
      3. Description 2101
      4. Output info 2103
      5. Restrictions 2103
      6. Related commands 2103
      7. Default 2104
  71. compute pair command 2104
      1. Syntax 2104
      2. Examples 2104
      3. Description 2104
      4. Output info 2105
      5. Restrictions 2105
      6. Related commands 2105
      7. Default 2105
  72. compute pair/local command 2105
      1. Syntax 2105
      2. Examples 2106
      3. Description 2106
      4. Output info 2107
      5. Restrictions 2108
      6. Related commands 2108
      7. Default 2108
  73. compute pe command 2108
      1. Syntax 2108
      2. Examples 2108
      3. Description 2108
      4. Output info 2109
      5. Restrictions 2109
      6. Related commands 2109
      7. Default 2109
  74. compute pe/atom command 2109
      1. Syntax 2109
      2. Examples 2110
      3. Description 2110
      4. Output info 2111
      5. Restrictions 2111
      6. Related commands 2111
      7. Default 2111
  75. compute plasticity/atom command 2111
      1. Syntax 2111
      2. Examples 2111
      3. Description 2111
      4. Output info 2112
      5. Restrictions 2112
      6. Related commands 2112
      7. Default 2112
  76. compute pod/atom command 2112
  77. compute podd/atom command 2112
  78. compute pod/local command 2112
  79. compute pod/global command 2112
      1. Syntax 2112
      2. Examples 2113
      3. Description 2113
      4. Output info 2113
      5. Restrictions 2114
      6. Related commands 2114
      7. Default 2114
  80. compute pressure command 2114
      1. Syntax 2114
      2. Examples 2114
      3. Description 2115
      4. Output info 2116
      5. Restrictions 2116
      6. Related commands 2116
      7. Default 2116
  81. compute pressure/alchemy command 2117
      1. Syntax 2117
      2. Examples 2117
      3. Description 2117
      4. Output info 2117
      5. Restrictions 2118
      6. Related commands 2118
      7. Default 2118
  82. compute pressure/uef command 2118
      1. Syntax 2118
      2. Examples 2118
      3. Description 2118
      4. Restrictions 2119
      5. Related commands 2119
      6. Default 2119
  83. compute property/atom command 2119
      1. Syntax 2119
      2. Examples 2121
      3. Description 2121
      4. Output info 2122
      5. Restrictions 2122
      6. Related commands 2122
      7. Default 2122
  84. compute property/chunk command 2122
      1. Syntax 2122
      2. Examples 2123
      3. Description 2123
      4. Output info 2124
      5. Restrictions 2124
      6. Related commands 2124
      7. Default 2124
  85. compute property/grid command 2124
      1. Syntax 2124
      2. Examples 2125
      3. Description 2125
      4. Output info 2125
      5. Restrictions 2126
      6. Related commands 2126
      7. Default 2126
  86. compute property/local command 2126
      1. Syntax 2126
      2. Examples 2127
      3. Description 2127
      4. Output info 2128
      5. Restrictions 2128
      6. Related commands 2128
      7. Default 2128
  87. compute ptm/atom command 2129
      1. Syntax 2129
      2. Examples 2129
      3. Description 2129
      4. Output info 2130
      5. Restrictions 2130
      6. Related commands 2131
      7. Default 2131
  88. compute rattlers/atom command 2131
      1. Syntax 2131
      2. Examples 2131
      3. Description 2131
      4. Output info 2132
      5. Restrictions 2132
      6. Related commands 2132
      7. Default 2132
  89. compute rdf command 2132
      1. Syntax 2132
      2. Examples 2133
      3. Description 2133
      4. Output info 2134
      5. Restrictions 2135
      6. Related commands 2135
      7. Default 2135
  90. compute reaxff/atom command 2135
      1. Syntax 2135
      2. Examples 2136
      3. Description 2136
      4. Output info 2136
      5. Restrictions 2137
      6. Related commands 2137
      7. Default 2137
  91. compute reduce command 2137
  92. compute reduce/region command 2137
      1. Syntax 2137
      2. Examples 2138
      3. Description 2138
      4. Output info 2140
      5. Restrictions 2140
      6. Related commands 2140
      7. Default 2140
  93. compute reduce/chunk command 2140
      1. Syntax 2140
      2. Examples 2141
      3. Description 2141
      4. Output info 2142
      5. Restrictions 2143
      6. Related commands 2143
      7. Default 2143
  94. compute rheo/property/atom command 2143
      1. Syntax 2143
      2. Examples 2144
      3. Description 2144
      4. Output info 2144
      5. Restrictions 2145
      6. Related commands 2145
      7. Default 2145
  95. compute rigid/local command 2145
      1. Syntax 2145
      2. Examples 2146
      3. Description 2146
      4. Output info 2147

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 3.99.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2147 |
| 3.99.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2148 |
| 3.99.7 | Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2148 |
| 3.100 | compute | saed command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2148 |
|  | 3.100.1 | Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2148 |
|  | 3.100.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2148 |
|  | 3.100.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2149 |
|  | 3.100.4 | Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2151 |
|  | 3.100.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2151 |
|  | 3.100.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2151 |
|  | 3.100.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2151 |
| 3.101 | compute slcsa/atom command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2151 |
|  | 3.101.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2151 |
|  | 3.101.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2152 |
|  | 3.101.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2152 |
|  | 3.101.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2153 |
|  | 3.101.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2153 |
|  | 3.101.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2153 |
|  | 3.101.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2153 |
| 3.102 | compute slice command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2153 |
|  | 3.102.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2153 |
|  | 3.102.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2154 |
|  | 3.102.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2154 |
|  | 3.102.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2155 |
|  | 3.102.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2155 |
|  | 3.102.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2155 |
|  | 3.102.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2155 |
| 3.103 | compute smd/contact/radius command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2155 |
|  | 3.103.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2155 |
|  | 3.103.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2155 |
|  | 3.103.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2156 |
|  | 3.103.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2156 |
|  | 3.103.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2156 |
|  | 3.103.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2156 |
|  | 3.103.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2156 |
| 3.104 | compute smd/damage command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2156 |
|  | 3.104.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2156 |
|  | 3.104.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2157 |
|  | 3.104.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2157 |
|  | 3.104.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2157 |
|  | 3.104.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2157 |
|  | 3.104.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2157 |
| 3.105 | compute smd/hourglass/error command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2157 |
|  | 3.105.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2157 |
|  | 3.105.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2158 |
|  | 3.105.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2158 |
|  | 3.105.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2158 |
|  | 3.105.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2158 |
|  | 3.105.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2158 |
| 3.106 | compute smd/internal/energy command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2158 |
|  | 3.106.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2158 |
|  | 3.106.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2159 |
|  | 3.106.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2159 |
|  | 3.106.4 Output Info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2159 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 3.106.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2159 |
|  | 3.106.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2159 |
|  | 3.106.7 | Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2159 |
| 3.107 | compute | smd/plastic/strain command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2159 |
|  | 3.107.1 | Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2159 |
|  | 3.107.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2160 |
|  | 3.107.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2160 |
|  | 3.107.4 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2160 |
|  | 3.107.5 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2160 |
|  | 3.107.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2160 |
| 3.108 | compute smd/plastic/strain/rate command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2160 |
|  | 3.108.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2160 |
|  | 3.108.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2161 |
|  | 3.108.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2161 |
|  | 3.108.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2161 |
|  | 3.108.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2161 |
|  | 3.108.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2161 |
| 3.109 | compute smd/rho command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2161 |
|  | 3.109.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2161 |
|  | 3.109.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2162 |
|  | 3.109.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2162 |
|  | 3.109.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2162 |
|  | 3.109.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2162 |
|  | 3.109.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2162 |
|  | 3.109.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2162 |
| 3.110 | compute smd/tlsph/defgrad command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2162 |
|  | 3.110.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2162 |
|  | 3.110.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2163 |
|  | 3.110.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2163 |
|  | 3.110.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2163 |
|  | 3.110.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2163 |
|  | 3.110.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2163 |
|  | 3.110.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2163 |
| 3.111 | compute smd/tlsph/dt command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2163 |
|  | 3.111.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2163 |
|  | 3.111.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2164 |
|  | 3.111.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2164 |
|  | 3.111.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2164 |
|  | 3.111.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2164 |
|  | 3.111.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2164 |
|  | 3.111.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2164 |
| 3.112 | compute smd/tlsph/num/neighs command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2164 |
|  | 3.112.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2164 |
|  | 3.112.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2165 |
|  | 3.112.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2165 |
|  | 3.112.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2165 |
|  | 3.112.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2165 |
|  | 3.112.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2165 |
|  | 3.112.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2165 |
| 3.113 | compute smd/tlsph/shape command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2165 |
|  | 3.113.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2165 |
|  | 3.113.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2166 |
|  | 3.113.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2166 |
|  | 3.113.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2166 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 3.113.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2166 |
|  | 3.113.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2166 |
|  | 3.113.7 | Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2166 |
| 3.114 | compute | smd/tlsph/strain command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2166 |
|  | 3.114.1 | Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2166 |
|  | 3.114.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2167 |
|  | 3.114.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2167 |
|  | 3.114.4 | Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2167 |
|  | 3.114.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2167 |
|  | 3.114.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2167 |
|  | 3.114.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2167 |
| 3.115 | compute smd/tlsph/strain/rate command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2167 |
|  | 3.115.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2167 |
|  | 3.115.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2168 |
|  | 3.115.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2168 |
|  | 3.115.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2168 |
|  | 3.115.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2168 |
|  | 3.115.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2168 |
|  | 3.115.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2168 |
| 3.116 | compute smd/tlsph/stress command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2168 |
|  | 3.116.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2168 |
|  | 3.116.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2169 |
|  | 3.116.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2169 |
|  | 3.116.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2169 |
|  | 3.116.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2169 |
|  | 3.116.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2169 |
|  | 3.116.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2169 |
| 3.117 | compute smd/triangle/vertices command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2169 |
|  | 3.117.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2169 |
|  | 3.117.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2170 |
|  | 3.117.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2170 |
|  | 3.117.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2170 |
|  | 3.117.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2170 |
|  | 3.117.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2170 |
|  | 3.117.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2170 |
| 3.118 | compute smd/ulsph/effm command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2170 |
|  | 3.118.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2170 |
|  | 3.118.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2171 |
|  | 3.118.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2171 |
|  | 3.118.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2171 |
|  | 3.118.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2171 |
|  | 3.118.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2171 |
|  | 3.118.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2171 |
| 3.119 | compute smd/ulsph/num/neighs command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2171 |
|  | 3.119.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2171 |
|  | 3.119.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2172 |
|  | 3.119.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2172 |
|  | 3.119.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2172 |
|  | 3.119.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2172 |
|  | 3.119.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2172 |
|  | 3.119.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2172 |
| 3.120 | compute smd/ulsph/strain command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2172 |
|  | 3.120.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2172 |
|  | 3.120.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2173 |

* + 1. Description 2173
    2. Output info 2173
    3. Restrictions 2173
    4. Related commands 2173
    5. Default 2173
  1. compute smd/ulsph/strain/rate command 2173
     1. Syntax 2173
     2. Examples 2174
     3. Description 2174
     4. Output info 2174
     5. Restrictions 2174
     6. Related commands 2174
     7. Default 2174
  2. compute smd/ulsph/stress command 2174
     1. Syntax 2174
     2. Examples 2175
     3. Description 2175
     4. Output info 2175
     5. Restrictions 2175
     6. Related commands 2175
     7. Default 2175
  3. compute smd/vol command 2175
     1. Syntax 2175
     2. Examples 2176
     3. Description 2176
     4. Output info 2176
     5. Restrictions 2176
     6. Related commands 2176
     7. Default 2176
  4. compute sna/atom command 2177
  5. compute snad/atom command 2177
  6. compute snav/atom command 2177
  7. compute snap command 2177
  8. compute sna/grid command 2177
  9. compute sna/grid/local command 2177
     1. Syntax 2177
     2. Examples 2178
     3. Description 2179
     4. Output info 2183
     5. Restrictions 2184
     6. Related commands 2184
     7. Default 2184
  10. compute sph/e/atom command 2185
      1. Syntax 2185
      2. Examples 2185
      3. Description 2185
      4. Output info 2185
      5. Restrictions 2186
      6. Related commands 2186
      7. Default 2186
  11. compute sph/rho/atom command 2186
      1. Syntax 2186
      2. Examples 2186
      3. Description 2186
      4. Output info 2186
      5. Restrictions 2187
      6. Related commands 2187
      7. Default 2187
  12. compute sph/t/atom command 2187
      1. Syntax 2187
      2. Examples 2187
      3. Description 2187
      4. Output info 2188
      5. Restrictions 2188
      6. Related commands 2188
      7. Default 2188
  13. compute spin command 2188
      1. Syntax 2188
      2. Examples 2188
      3. Description 2188
      4. Output info 2189
      5. Restrictions 2189
      6. Default 2189
  14. compute stress/atom command 2189
  15. compute centroid/stress/atom command 2189
      1. Syntax 2189
      2. Examples 2190
      3. Description 2190
      4. Output info 2192
      5. Restrictions 2193
      6. Related commands 2193
      7. Default 2193
  16. compute stress/cartesian command 2193
      1. Syntax 2193
      2. Examples 2194
      3. Description 2194
      4. Output info 2194
      5. Restrictions 2195
      6. Related commands 2195
  17. compute stress/cylinder command 2195
  18. compute stress/spherical command 2195
      1. Syntax 2195
      2. Examples 2195
      3. Description 2196
      4. Output info 2196
      5. Restrictions 2196
      6. Related commands 2197
      7. Default 2197
  19. compute stress/mop command 2197
  20. compute stress/mop/profile command 2197
      1. Syntax 2197
      2. Examples 2197
      3. Description 2198
      4. Output info 2198
      5. Restrictions 2199
      6. Related commands 2199
      7. Default 2199
  21. compute force/tally command 2199
  22. compute heat/flux/tally command 2199
  23. compute heat/flux/virial/tally command 2199
  24. compute pe/tally command 2199
  25. compute pe/mol/tally command 2199
  26. compute stress/tally command 2199
      1. Syntax 2199
      2. Examples 2200
      3. Description 2200
      4. Output info 2201
      5. Restrictions 2202
      6. Related commands 2202
      7. Default 2202
  27. compute tdpd/cc/atom command 2202
      1. Syntax 2202
      2. Examples 2202
      3. Description 2203
      4. Output info 2203
      5. Restrictions 2203
      6. Related commands 2203
      7. Default 2203
  28. compute temp command 2203
      1. Syntax 2203
      2. Examples 2204
      3. Description 2204
      4. Output info 2205
      5. Restrictions 2205
      6. Related commands 2205
      7. Default 2205
  29. compute temp/asphere command 2205
      1. Syntax 2205
      2. Examples 2206
      3. Description 2206
      4. Output info 2207
      5. Restrictions 2207
      6. Related commands 2207
      7. Default 2208
  30. compute temp/body command 2208
      1. Syntax 2208
      2. Examples 2208
      3. Description 2208
      4. Output info 2209
      5. Restrictions 2209
      6. Related commands 2210
      7. Default 2210
  31. compute temp/chunk command 2210
      1. Syntax 2210
      2. Examples 2210
      3. Description 2211
      4. Output info 2213
      5. Restrictions 2213
      6. Related commands 2213
      7. Default 2213
  32. compute temp/com command 2213
      1. Syntax 2213

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 3.152.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2213 |
| 3.152.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2214 |
| 3.152.4 | Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2214 |
| 3.152.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2214 |
| 3.152.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2215 |
| 3.152.7 | Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2215 |
| 3.153 | compute | temp/cs command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2215 |
|  | 3.153.1 | Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2215 |
|  | 3.153.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2215 |
|  | 3.153.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2215 |
|  | 3.153.4 | Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2216 |
|  | 3.153.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2216 |
|  | 3.153.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2216 |
|  | 3.153.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2216 |
| 3.154 | compute temp/deform command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2217 |
|  | 3.154.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2217 |
|  | 3.154.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2217 |
|  | 3.154.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2217 |
|  | 3.154.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2218 |
|  | 3.154.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2218 |
|  | 3.154.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2218 |
|  | 3.154.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2219 |
| 3.155 | compute temp/deform/eff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2219 |
|  | 3.155.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2219 |
|  | 3.155.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2219 |
|  | 3.155.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2219 |
|  | 3.155.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2219 |
|  | 3.155.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2220 |
|  | 3.155.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2220 |
|  | 3.155.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2220 |
| 3.156 | compute temp/drude command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2220 |
|  | 3.156.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2220 |
|  | 3.156.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2220 |
|  | 3.156.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2220 |
|  | 3.156.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2221 |
|  | 3.156.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2221 |
|  | 3.156.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2221 |
|  | 3.156.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2221 |
| 3.157 | compute temp/eff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2221 |
|  | 3.157.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2221 |
|  | 3.157.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2222 |
|  | 3.157.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2222 |
|  | 3.157.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2223 |
|  | 3.157.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2223 |
|  | 3.157.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2223 |
|  | 3.157.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2223 |
| 3.158 | compute temp/partial command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2223 |
|  | 3.158.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2223 |
|  | 3.158.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2223 |
|  | 3.158.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2223 |
|  | 3.158.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2224 |
|  | 3.158.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2224 |
|  | 3.158.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2225 |
|  | 3.158.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2225 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 3.159 | compute temp/profile command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2225 |
|  | 3.159.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2225 |
|  | 3.159.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2225 |
|  | 3.159.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2226 |
|  | 3.159.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2227 |
|  | 3.159.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2227 |
|  | 3.159.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2227 |
|  | 3.159.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2228 |
| 3.160 | compute temp/ramp command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2228 |
|  | 3.160.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2228 |
|  | 3.160.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2228 |
|  | 3.160.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2228 |
|  | 3.160.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2229 |
|  | 3.160.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2229 |
|  | 3.160.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2229 |
|  | 3.160.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2229 |
| 3.161 | compute temp/region command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2230 |
|  | 3.161.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2230 |
|  | 3.161.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2230 |
|  | 3.161.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2230 |
|  | 3.161.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2231 |
|  | 3.161.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2231 |
|  | 3.161.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2231 |
|  | 3.161.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2231 |
| 3.162 | compute temp/region/eff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2231 |
|  | 3.162.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2231 |
|  | 3.162.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2231 |
|  | 3.162.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2232 |
|  | 3.162.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2232 |
|  | 3.162.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2232 |
|  | 3.162.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2232 |
|  | 3.162.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2232 |
| 3.163 | compute temp/rotate command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2232 |
|  | 3.163.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2232 |
|  | 3.163.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2233 |
|  | 3.163.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2233 |
|  | 3.163.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2233 |
|  | 3.163.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2234 |
|  | 3.163.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2234 |
|  | 3.163.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2234 |
| 3.164 | compute temp/sphere command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2234 |
|  | 3.164.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2234 |
|  | 3.164.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2234 |
|  | 3.164.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2234 |
|  | 3.164.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2236 |
|  | 3.164.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2236 |
|  | 3.164.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2236 |
|  | 3.164.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2236 |
| 3.165 | compute temp/uef command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2236 |
|  | 3.165.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2236 |
|  | 3.165.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2236 |
|  | 3.165.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2237 |
|  | 3.165.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2237 |
|  | 3.165.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2237 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 3.165.6 | Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2237 |
| 3.166 | compute ti | command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2237 |
|  | 3.166.1 | Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2237 |
|  | 3.166.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2238 |
|  | 3.166.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2238 |
|  | 3.166.4 | Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2239 |
|  | 3.166.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2239 |
|  | 3.166.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2239 |
|  | 3.166.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2239 |
| 3.167 | compute torque/chunk command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2239 |
|  | 3.167.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2239 |
|  | 3.167.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2239 |
|  | 3.167.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2240 |
|  | 3.167.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2240 |
|  | 3.167.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2240 |
|  | 3.167.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2241 |
|  | 3.167.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2241 |
| 3.168 | compute vacf command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2241 |
|  | 3.168.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2241 |
|  | 3.168.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2241 |
|  | 3.168.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2241 |
|  | 3.168.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2242 |
|  | 3.168.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2242 |
|  | 3.168.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2242 |
|  | 3.168.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2242 |
| 3.169 | compute vcm/chunk command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2242 |
|  | 3.169.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2242 |
|  | 3.169.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2242 |
|  | 3.169.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2242 |
|  | 3.169.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2243 |
|  | 3.169.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2243 |
|  | 3.169.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2243 |
|  | 3.169.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2243 |
| 3.170 | compute viscosity/cos command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2243 |
|  | 3.170.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2243 |
|  | 3.170.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2244 |
|  | 3.170.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2244 |
|  | 3.170.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2245 |
|  | 3.170.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2245 |
|  | 3.170.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2245 |
|  | 3.170.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2245 |
| 3.171 | compute voronoi/atom command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2246 |
|  | 3.171.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2246 |
|  | 3.171.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2246 |
|  | 3.171.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2246 |
|  | 3.171.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2248 |
|  | 3.171.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2248 |
|  | 3.171.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2249 |
|  | 3.171.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2249 |
| 3.172 | compute xrd command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2249 |
|  | 3.172.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2249 |
|  | 3.172.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2249 |
|  | 3.172.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2250 |
|  | 3.172.4 Output info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | 2252 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 3.172.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2252 |
| 3.172.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2252 |
| 3.172.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2252 |
| **4** | **Pair Styles** | **2253** |
|  | 4.1 pair\_style adp command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2253 |
|  | 4.1.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2253 |
|  | 4.1.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2253 |
|  | 4.1.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2253 |
|  | 4.1.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2255 |
|  | 4.1.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2255 |
|  | 4.1.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2255 |
|  | 4.1.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2255 |
|  | 4.2 pair\_style agni command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2256 |
|  | 4.2.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2256 |
|  | 4.2.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2256 |
|  | 4.2.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2256 |
|  | 4.2.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2257 |
|  | 4.2.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2257 |
|  | 4.2.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2257 |
|  | 4.2.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2257 |
|  | 4.3 pair\_style aip/water/2dm command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2258 |
|  | 4.3.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2258 |
|  | 4.3.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2258 |
|  | 4.3.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2258 |
|  | 4.3.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2260 |
|  | 4.3.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2260 |
|  | 4.3.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2260 |
|  | 4.3.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2260 |
|  | 4.4 pair\_style airebo command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2261 |
|  | 4.5 pair\_style airebo/morse command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2261 |
|  | 4.6 pair\_style rebo command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2261 |
|  | 4.6.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2261 |
|  | 4.6.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2261 |
|  | 4.6.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2261 |
|  | 4.6.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2263 |
|  | 4.6.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2264 |
|  | 4.6.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2264 |
|  | 4.6.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2264 |
|  | 4.7 pair\_style amoeba command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2264 |
|  | 4.8 pair\_style hippo command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2264 |
|  | 4.8.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2264 |
|  | 4.8.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2265 |
|  | 4.8.3 Additional info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2265 |
|  | 4.8.4 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2265 |
|  | 4.8.5 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2267 |
|  | 4.8.6 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2267 |
|  | 4.8.7 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2268 |
|  | 4.8.8 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2268 |
|  | 4.9 pair\_style atm command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2269 |
|  | 4.9.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2269 |
|  | 4.9.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2269 |
|  | 4.9.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2269 |
|  | 4.9.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2271 |

* + 1. Restrictions 2271
    2. Related commands 2271
    3. Default 2271
  1. pair\_style awpmd/cut command 2271
     1. Syntax 2271
     2. Examples 2272
     3. Description 2272
     4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2273
     5. Restrictions 2273
     6. Related commands 2273
     7. Default 2273
  2. pair\_style beck command 2273
     1. Syntax 2273
     2. Examples 2273
     3. Description 2274
     4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2274
     5. Restrictions 2275
     6. Related commands 2275
     7. Default 2275
  3. pair\_style body/nparticle command 2275
     1. Syntax 2275
     2. Examples 2275
     3. Description 2275
     4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2276
     5. Restrictions 2277
     6. Related commands 2277
     7. Default 2277
  4. pair\_style body/rounded/polygon command 2277
     1. Syntax 2277
     2. Examples 2277
     3. Description 2277
     4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2280
     5. Restrictions 2280
     6. Related commands 2280
     7. Default 2280
  5. pair\_style body/rounded/polyhedron command 2280
     1. Syntax 2280
     2. Examples 2281
     3. Description 2281
     4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2283
     5. Restrictions 2283
     6. Related commands 2283
     7. Default 2283
  6. pair\_style bop command 2283
     1. Syntax 2283
     2. Examples 2283
     3. Description 2284
     4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2288
     5. Restrictions 2288
     6. Related commands 2289
     7. Default 2289
  7. pair\_style born command 2289
  8. pair\_style born/coul/long command 2289
  9. pair\_style born/coul/msm command 2289
  10. pair\_style born/coul/wolf command 2289
  11. pair\_style born/coul/dsf command 2289
      1. Syntax 2289
      2. Examples 2290
      3. Description 2291
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2292
      5. Restrictions 2292
      6. Related commands 2292
      7. Default 2292
  12. pair\_style born/gauss command 2292
      1. Syntax 2292
      2. Examples 2293
      3. Description 2293
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2293
      5. Restrictions 2294
      6. Related commands 2294
      7. Default 2294
  13. pair\_style bpm/spring command 2294
      1. Syntax 2294
      2. Examples 2294
      3. Description 2294
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2295
      5. Restrictions 2295
      6. Related commands 2295
      7. Default 2296
  14. pair\_style brownian command 2296
  15. pair\_style brownian/poly command 2296
      1. Syntax 2296
      2. Examples 2296
      3. Description 2296
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2297
      5. Restrictions 2298
      6. Related commands 2298
      7. Default 2298
  16. pair\_style buck command 2298
  17. pair\_style buck/coul/cut command 2298
  18. pair\_style buck/coul/long command 2298
  19. pair\_style buck/coul/msm command 2298
      1. Syntax 2298
      2. Examples 2299
      3. Description 2299
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2300
      5. Restrictions 2301
      6. Related commands 2301
      7. Default 2301
  20. pair\_style buck6d/coul/gauss/dsf command 2301
  21. pair\_style buck6d/coul/gauss/long command 2301
      1. Syntax 2301
      2. Examples 2302
      3. Description 2302
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2303
      5. Restrictions 2303
      6. Related commands 2303
      7. Default 2303
  22. pair\_style buck/long/coul/long command 2303
      1. Syntax 2303
      2. Examples 2304
      3. Description 2304
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2305
      5. Restrictions 2305
      6. Related commands 2306
      7. Default 2306
  23. pair\_style lj/charmm/coul/charmm command 2306
  24. pair\_style lj/charmm/coul/charmm/implicit command 2306
  25. pair\_style lj/charmm/coul/long command 2306
  26. pair\_style lj/charmm/coul/msm command 2306
  27. pair\_style lj/charmmfsw/coul/charmmfsh command 2306
  28. pair\_style lj/charmmfsw/coul/long command 2306
      1. Syntax 2307
      2. Examples 2307
      3. Description 2308
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2309
      5. Restrictions 2310
      6. Related commands 2310
      7. Default 2310
  29. pair\_style lj/class2 command 2310
  30. pair\_style lj/class2/coul/cut command 2310
  31. pair\_style lj/class2/coul/long command 2310
      1. Syntax 2310
      2. Examples 2311
      3. Description 2311
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2312
      5. Restrictions 2312
      6. Related commands 2313
      7. Default 2313
  32. pair\_style colloid command 2313
      1. Syntax 2313
      2. Examples 2313
      3. Description 2313
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2316
      5. Restrictions 2316
      6. Related commands 2316
      7. Default 2316
  33. pair\_style comb command 2316
  34. pair\_style comb3 command 2317
      1. Syntax 2317
      2. Examples 2317
      3. Description 2317
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2319
      5. Restrictions 2319
      6. Related commands 2319
      7. Default 2319
  35. pair\_style cosine/squared command 2319
      1. Syntax 2319
      2. Examples 2320
      3. Description 2320
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2321
      5. Restrictions 2321

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 4.44.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2321 |
| 4.44.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2321 |
| 4.45 | pair\_style coul/cut command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2322 |
| 4.46 | pair\_style coul/cut/global command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2322 |
| 4.47 | pair\_style coul/debye command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2322 |
| 4.48 | pair\_style coul/dsf command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2322 |
| 4.49 | pair\_style coul/exclude command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2322 |
| 4.50 | pair\_style coul/long command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2322 |
| 4.51 | pair\_style coul/msm command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2322 |
| 4.52 | pair\_style coul/streitz command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2322 |
| 4.53 | pair\_style coul/wolf command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2322 |
| 4.54 | pair\_style tip4p/cut command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2323 |
| 4.55 | pair\_style tip4p/long command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2323 |
|  | 4.55.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2323 |
|  | 4.55.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2323 |
|  | 4.55.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2324 |
|  | 4.55.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2327 |
|  | 4.55.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2327 |
|  | 4.55.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2327 |
|  | 4.55.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2327 |
| 4.56 | pair\_style coul/diel command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2328 |
|  | 4.56.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2328 |
|  | 4.56.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2328 |
|  | 4.56.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2328 |
|  | 4.56.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2329 |
|  | 4.56.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2329 |
|  | 4.56.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2329 |
|  | 4.56.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2329 |
| 4.57 | pair\_style coul/shield command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2329 |
|  | 4.57.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2329 |
|  | 4.57.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2330 |
|  | 4.57.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2330 |
|  | 4.57.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2330 |
|  | 4.57.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2331 |
|  | 4.57.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2331 |
|  | 4.57.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2331 |
| 4.58 | pair\_style coul/slater command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2331 |
| 4.59 | pair\_style coul/slater/cut command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2331 |
| 4.60 | pair\_style coul/slater/long command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2331 |
|  | 4.60.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2331 |
|  | 4.60.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2331 |
|  | 4.60.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2332 |
|  | 4.60.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2332 |
|  | 4.60.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2332 |
|  | 4.60.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2333 |
|  | 4.60.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2333 |
| 4.61 | pair\_style coul/tt command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2333 |
|  | 4.61.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2333 |
|  | 4.61.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2333 |
|  | 4.61.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2333 |
|  | 4.61.4 Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2334 |
|  | 4.61.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2334 |
|  | 4.61.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2334 |
|  | 4.61.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2334 |

* 1. pair\_style born/coul/dsf/cs command 2335
  2. pair\_style born/coul/long/cs command 2335
  3. pair\_style born/coul/wolf/cs command 2335
  4. pair\_style buck/coul/long/cs command 2335
  5. pair\_style coul/long/cs command 2335
  6. pair\_style coul/wolf/cs command 2335
  7. pair\_style lj/cut/coul/long/cs command 2335
  8. pair\_style lj/class2/coul/long/cs command 2335
     1. Syntax 2335
     2. Examples 2336
     3. Description 2336
     4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2337
     5. Restrictions 2338
     6. Related commands 2338
     7. Default 2338
  9. pair\_style coul/cut/dielectric command 2338
  10. pair\_style coul/long/dielectric command 2338
  11. pair\_style lj/cut/coul/cut/dielectric command 2338
  12. pair\_style lj/cut/coul/debye/dielectric command 2338
  13. pair\_style lj/cut/coul/long/dielectric command 2338
  14. pair\_style lj/cut/coul/msm/dielectric command 2338
  15. pair\_style lj/long/coul/long/dielectric command 2338
      1. Syntax 2338
      2. Examples 2339
      3. Description 2339
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2340
      5. Restrictions 2340
      6. Related commands 2340
      7. Default 2340
  16. pair\_style lj/cut/dipole/cut command 2340
  17. pair\_style lj/sf/dipole/sf command 2340
  18. pair\_style lj/cut/dipole/long command 2340
  19. pair\_style lj/long/dipole/long command 2341
      1. Syntax 2341
      2. Examples 2341
      3. Description 2342
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2345
      5. Restrictions 2346
      6. Related commands 2346
      7. Default 2346
  20. pair\_style dpd command 2346
  21. pair\_style dpd/tstat command 2346
      1. Syntax 2346
      2. Examples 2347
      3. Description 2347
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2348
      5. Restrictions 2349
      6. Related commands 2349
      7. Default 2349
  22. pair\_style dpd/coul/slater/long command 2349
      1. Syntax 2350
      2. Examples 2350
      3. Description 2350
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2351
      5. Restrictions 2352
      6. Related commands 2352
      7. Default 2352
  23. pair\_style dpd/ext command 2352
  24. pair\_style dpd/ext/tstat command 2352
      1. Syntax 2352
      2. Examples 2353
      3. Description 2353
      4. Restrictions 2355
      5. Related commands 2355
  25. pair\_style dpd/fdt command 2355
  26. pair\_style dpd/fdt/energy command 2355
      1. Syntax 2356
      2. Examples 2356
      3. Description 2356
      4. Restrictions 2358
      5. Related commands 2358
      6. Default 2358
  27. pair\_style drip command 2358
      1. Syntax 2358
      2. Examples 2358
      3. Description 2359
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2360
      5. Restrictions 2360
      6. Related commands 2360
  28. pair\_style dsmc command 2360
      1. Syntax 2360
      2. Examples 2361
      3. Description 2361
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2362
      5. Restrictions 2362
      6. Related commands 2362
      7. Default 2362
  29. pair\_style e3b command 2362
      1. Syntax 2362
      2. Examples 2363
      3. Description 2363
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2365
      5. Restrictions 2365
      6. Related commands 2365
      7. Default 2365
  30. pair\_style eam command 2365
  31. pair\_style eam/alloy command 2366
  32. pair\_style eam/cd command 2366
  33. pair\_style eam/cd/old command 2366
  34. pair\_style eam/fs command 2366
  35. pair\_style eam/he command 2366
      1. Syntax 2366
      2. Examples 2366
      3. Description 2367
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2372
      5. Restrictions 2372
      6. Related commands 2372
      7. Default 2372
  36. pair\_style edip command 2373
  37. pair\_style edip/multi command 2373
      1. Syntax 2373
      2. Examples 2373
      3. Description 2373
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2375
      5. Restrictions 2375
      6. Related commands 2375
      7. Default 2375
  38. pair\_style eff/cut command 2376
      1. Syntax 2376
      2. Examples 2376
      3. Description 2376
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2379
      5. Restrictions 2379
      6. Related commands 2379
      7. Default 2380
  39. pair\_style eim command 2380
      1. Syntax 2380
      2. Examples 2380
      3. Description 2380
      4. Restrictions 2382
      5. Related commands 2382
      6. Default 2382
  40. pair\_style exp6/rx command 2383
      1. Syntax 2383
      2. Examples 2383
      3. Description 2383
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2385
      5. Restrictions 2385
      6. Related commands 2385
      7. Default 2385
  41. pair\_style extep command 2385
      1. Syntax 2385
      2. Examples 2386
      3. Description 2386
      4. Restrictions 2386
      5. Related commands 2386
      6. Default 2386
  42. pair\_style lj/cut/soft command 2386
  43. pair\_style lj/cut/coul/cut/soft command 2386
  44. pair\_style lj/cut/coul/long/soft command 2386
  45. pair\_style lj/cut/tip4p/long/soft command 2387
  46. pair\_style lj/charmm/coul/long/soft command 2387
  47. pair\_style lj/class2/soft command 2387
  48. pair\_style lj/class2/coul/cut/soft command 2387
  49. pair\_style lj/class2/coul/long/soft command 2387
  50. pair\_style coul/cut/soft command 2387
  51. pair\_style coul/long/soft command 2387
  52. pair\_style tip4p/long/soft command 2387
  53. pair\_style morse/soft command 2387
      1. Syntax 2387
      2. Examples 2389
      3. Description 2390
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2393
      5. Restrictions 2393
      6. Related commands 2393
      7. Default 2394
  54. pair\_style gauss command 2394
  55. pair\_style gauss/cut command 2394
      1. Syntax 2394
      2. Examples 2394
      3. Description 2394
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2395
      5. Restrictions 2396
      6. Related commands 2396
      7. Default 2397
  56. pair\_style gayberne command 2397
      1. Syntax 2397
      2. Examples 2397
      3. Description 2397
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2399
      5. Restrictions 2399
      6. Related commands 2400
      7. Default 2400
  57. pair\_style gran/hooke command 2400
  58. pair\_style gran/hooke/history command 2400
  59. pair\_style gran/hertz/history command 2400
      1. Syntax 2400
      2. Examples 2401
      3. Description 2401
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2403
      5. Restrictions 2404
      6. Related commands 2404
      7. Default 2404
  60. pair\_style granular command 2404
      1. Syntax 2404
      2. Examples 2404
      3. Description 2405
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2413
      5. Restrictions 2414
      6. Related commands 2414
      7. Default 2415
      8. References 2415
  61. pair\_style lj/gromacs command 2416
  62. pair\_style lj/gromacs/coul/gromacs command 2416
      1. Syntax 2416
      2. Examples 2416
      3. Description 2416
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2417
      5. Restrictions 2418
      6. Related commands 2418
      7. Default 2418
  63. pair\_style gw command 2418
  64. pair\_style gw/zbl command 2418
      1. Syntax 2418
      2. Examples 2418
      3. Description 2419
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2419
      5. Restrictions 2420
      6. Related commands 2420
      7. Default 2420
  65. pair\_style harmonic/cut command 2420
      1. Syntax 2420
      2. Examples 2420
      3. Description 2420
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2421
      5. Restrictions 2421
      6. Related commands 2421
      7. Default 2421
  66. pair\_style hbond/dreiding/lj command 2422
  67. pair\_style hbond/dreiding/morse command 2422
      1. Syntax 2422
      2. Examples 2422
      3. Description 2422
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2425
      5. Restrictions 2426
      6. Related commands 2426
      7. Default 2426
  68. pair\_style hdnnp command 2426
      1. Syntax 2426
      2. Examples 2427
      3. Description 2427
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2429
      5. Restrictions 2429
  69. pair\_style hybrid command 2429
  70. pair\_style hybrid/molecular command 2429
  71. pair\_style hybrid/overlay command 2430
  72. pair\_style hybrid/scaled command 2430
      1. Syntax 2430
      2. Examples 2430
      3. Description 2431
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2436
      5. Restrictions 2436
      6. Related commands 2436
      7. Default 2436
  73. pair\_style ilp/graphene/hbn command 2437
      1. Syntax 2437
      2. Examples 2437
      3. Description 2437
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2439
      5. Restrictions 2439
      6. Related commands 2439
      7. Default 2439
  74. pair\_style ilp/tmd command 2440
      1. Syntax 2440
      2. Examples 2440
      3. Description 2440
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2442
      5. Restrictions 2442
      6. Related commands 2442
      7. Default 2442
  75. pair\_style kim command 2442
      1. Syntax 2442
      2. Examples 2442
      3. Description 2443
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2443
      5. Restrictions 2444
      6. Related commands 2444
      7. Default 2444
  76. pair\_style kolmogorov/crespi/full command 2444
      1. Syntax 2444
      2. Examples 2444
      3. Description 2444
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2446
      5. Restrictions 2446
      6. Related commands 2446
      7. Default 2446
  77. pair\_style kolmogorov/crespi/z command 2446
      1. Syntax 2446
      2. Examples 2446
      3. Description 2447
      4. Restrictions 2447
      5. Related commands 2447
      6. Default 2447
  78. pair\_style lcbop command 2448
      1. Syntax 2448
      2. Examples 2448
      3. Description 2448
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2448
      5. Restrictions 2449
      6. Related commands 2449
      7. Default 2449
  79. pair\_style lebedeva/z command 2449
      1. Syntax 2449
      2. Examples 2449
      3. Description 2449
      4. Restrictions 2450
      5. Related commands 2450
      6. Default 2450
  80. pair\_style lepton command 2451
      1. Syntax 2451
      2. Examples 2451
      3. Description 2452
      4. Lepton expression syntax and features 2453
      5. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2454
      6. Restrictions 2454
      7. Related commands 2454
      8. Default 2455
  81. pair\_style line/lj command 2455
      1. Syntax 2455
      2. Examples 2455
      3. Description 2455
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2456
      5. Restrictions 2456
      6. Related commands 2457
      7. Default 2457
  82. pair\_style list command 2457
      1. Syntax 2457
      2. Examples 2457
      3. Description 2457
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2459
      5. Restrictions 2459
      6. Related commands 2459
      7. Default 2459
  83. pair\_style lj/cut command 2459
      1. Syntax 2460
      2. Examples 2460
      3. Description 2460
      4. Coefficients 2460
      5. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2461
      6. Related commands 2461
      7. Default 2462
  84. pair\_style lj96/cut command 2462
      1. Syntax 2462
      2. Examples 2462
      3. Description 2462
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2463
      5. Restrictions 2463
      6. Related commands 2463
      7. Default 2463
  85. pair\_style lj/cubic command 2463
      1. Syntax 2463
      2. Examples 2464
      3. Description 2464
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2465
      5. Restrictions 2465
      6. Related commands 2465
      7. Default 2465
  86. pair\_style lj/cut/coul/cut command 2465
  87. pair\_style lj/cut/coul/debye command 2465
  88. pair\_style lj/cut/coul/dsf command 2466
  89. pair\_style lj/cut/coul/long command 2466
  90. pair\_style lj/cut/coul/msm command 2466
  91. pair\_style lj/cut/coul/wolf command 2466
      1. Syntax 2466
      2. Examples 2467
      3. Description 2467
      4. Coefficients 2468
      5. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2469
      6. Restrictions 2469
      7. Related commands 2470
      8. Default 2470
  92. pair\_style lj/cut/sphere command 2470
      1. Syntax 2470
      2. Examples 2470
      3. Description 2470
      4. Coefficients 2472
      5. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2472
      6. Restrictions 2473
      7. Related commands 2473
      8. Default 2473
  93. pair\_style lj/cut/tip4p/cut command 2473
  94. pair\_style lj/cut/tip4p/long command 2473
      1. Syntax 2473
      2. Examples 2474
      3. Description 2474
      4. Coefficients 2475
      5. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2476
      6. Restrictions 2476
      7. Related commands 2476
      8. Default 2476
  95. pair\_style lj/expand command 2477
  96. pair\_style lj/expand/coul/long command 2477
      1. Syntax 2477
      2. Examples 2477
      3. Description 2477
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2478
      5. Restrictions 2478
      6. Related commands 2478
      7. Default 2478
  97. pair\_style lj/expand/sphere command 2479
      1. Syntax 2479
      2. Examples 2479
      3. Description 2479
      4. Coefficients 2480
      5. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2481
      6. Restrictions 2481
      7. Related commands 2481
      8. Default 2481
  98. pair\_style lj/long/coul/long command 2481
  99. pair\_style lj/long/tip4p/long command 2482
      1. Syntax 2482
      2. Examples 2482
      3. Description 2483
      4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2484
      5. Restrictions 2485
      6. Related commands 2485
      7. Default 2485
  100. pair\_style lj/relres command 2485
       1. Syntax 2485
       2. Examples 2486
       3. Description 2486
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2489
       5. Restrictions 2489
       6. Related commands 2489
       7. Default 2489
  101. pair\_style lj/smooth command 2489
       1. Syntax 2490
       2. Examples 2490
       3. Description 2490
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2491
       5. Restrictions 2491
       6. Related commands 2491
       7. Default 2491
  102. pair\_style lj/smooth/linear command 2491
       1. Syntax 2492
       2. Examples 2492
       3. Description 2492
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2493
       5. Restrictions 2493
       6. Related commands 2493
       7. Default 2493
  103. pair\_style lj/switch3/coulgauss/long command 2493
  104. pair\_style mm3/switch3/coulgauss/long command 2493
       1. Syntax 2493
       2. Examples 2494
       3. Description 2494
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2495
       5. Restrictions 2495
       6. Related commands 2495
       7. Default 2495
  105. pair\_style local/density command 2496
       1. Syntax 2496
       2. Examples 2496
       3. Description 2496
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2498
       5. Restrictions 2499
       6. Related commands 2499
       7. Default 2499
  106. pair\_style lubricate command 2499
  107. pair\_style lubricate/poly command 2499
       1. Syntax 2499
       2. Examples 2500
       3. Description 2500
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2502
       5. Restrictions 2502
       6. Related commands 2502
       7. Default 2502
  108. pair\_style lubricateU command 2503
  109. pair\_style lubricateU/poly command 2503
       1. Syntax 2503
       2. Examples 2503
       3. Description 2503
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2505
       5. Restrictions 2505
       6. Related commands 2505
       7. Default 2506
  110. pair\_style lj/mdf command 2506
  111. pair\_style buck/mdf command 2506
  112. pair\_style lennard/mdf command 2506
       1. Syntax 2506
       2. Examples 2506
       3. Description 2507
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2508
       5. Restrictions 2508
       6. Related commands 2508
       7. Default 2508
  113. pair\_style meam command 2508
  114. pair\_style meam/ms command 2509
       1. Syntax 2509
       2. Examples 2509
       3. Description 2509
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2514
       5. Restrictions 2515
       6. Related commands 2515
       7. Default 2515
  115. pair\_style meam/spline command 2515
       1. Syntax 2515
       2. Examples 2515
       3. Description 2516
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2517
       5. Restrictions 2517
       6. Related commands 2517
       7. Default 2518
  116. pair\_style meam/sw/spline command 2518
       1. Syntax 2518
       2. Examples 2518
       3. Description 2518
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2519
       5. Restrictions 2519
       6. Related commands 2520
       7. Default 2520
  117. pair\_style mesocnt command 2520
  118. pair\_style mesocnt/viscous command 2520
       1. Syntax 2520
       2. Examples 2520
       3. Description 2520
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2523
       5. Restrictions 2523
       6. Related commands 2523
       7. Default 2523
  119. pair\_style edpd command 2523
  120. pair\_style mdpd command 2523
  121. pair\_style mdpd/rhosum command 2524
  122. pair\_style tdpd command 2524
       1. Syntax 2524
       2. Examples 2524
       3. Description 2524
       4. Example scripts 2527
       5. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2529
       6. Restrictions 2529
       7. Related commands 2529
       8. Default 2529
  123. pair\_style mgpt command 2530
       1. Syntax 2530
       2. Examples 2530
       3. Description 2530
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2531
       5. Restrictions 2532
       6. Related commands 2532
       7. Default 2532
  124. pair\_style mie/cut command 2532
       1. Syntax 2533
       2. Examples 2533
       3. Description 2533
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2533
       5. Restrictions 2534
       6. Related commands 2534
       7. Default 2534
  125. pair\_style mliap command 2534
       1. Syntax 2534
       2. Examples 2535
       3. Description 2535
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2538
       5. Restrictions 2538
       6. Related commands 2538
       7. Default 2538
  126. pair\_style momb command 2539
       1. Syntax 2539
       2. Examples 2539
       3. Description 2539
       4. Restrictions 2540
       5. Related commands 2540
       6. Default 2540
  127. pair\_style morse command 2540
  128. pair\_style morse/smooth/linear command 2540
       1. Syntax 2540
       2. Examples 2541
       3. Description 2541
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2542
       5. Restrictions 2542
       6. Related commands 2542
       7. Default 2542
  129. pair\_style multi/lucy command 2542
       1. Syntax 2542
       2. Examples 2542
       3. Description 2543
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2544
       5. Restrictions 2545
       6. Related commands 2545
       7. Default 2545
  130. pair\_style multi/lucy/rx command 2545
       1. Syntax 2545
       2. Examples 2545
       3. Description 2546
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2548
       5. Restrictions 2548
       6. Related commands 2548
       7. Default 2548
  131. pair\_style nb3b/harmonic command 2549
  132. pair\_style nb3b/screened command 2549
       1. Syntax 2549
       2. Examples 2549
       3. Description 2549
       4. Restrictions 2550
       5. Related commands 2550
       6. Default 2550
  133. pair\_style nm/cut command 2550
  134. pair\_style nm/cut/split command 2551
  135. pair\_style nm/cut/coul/cut command 2551
  136. pair\_style nm/cut/coul/long command 2551
       1. Syntax 2551
       2. Examples 2551
       3. Description 2552
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2553
       5. Restrictions 2553
       6. Related commands 2553
       7. Default 2553
  137. pair\_style none command 2554
       1. Syntax 2554
       2. Examples 2554
       3. Description 2554
       4. Restrictions 2554
       5. Related commands 2554
       6. Default 2554
  138. pair\_style oxdna/excv command 2555
  139. pair\_style oxdna/stk command 2555
  140. pair\_style oxdna/hbond command 2555
  141. pair\_style oxdna/xstk command 2555
  142. pair\_style oxdna/coaxstk command 2555
       1. Syntax 2555
       2. Examples 2555
       3. Description 2557
       4. Potential file reading 2558
       5. Restrictions 2558
       6. Related commands 2558
       7. Default 2559
  143. pair\_style oxdna2/excv command 2559
  144. pair\_style oxdna2/stk command 2559
  145. pair\_style oxdna2/hbond command 2559
  146. pair\_style oxdna2/xstk command 2559
  147. pair\_style oxdna2/coaxstk command 2559
  148. pair\_style oxdna2/dh command 2559
       1. Syntax 2559
       2. Examples 2560
       3. Description 2561
       4. Potential file reading 2562
       5. Restrictions 2563
       6. Related commands 2563
       7. Default 2563
  149. pair\_style oxrna2/excv command 2563
  150. pair\_style oxrna2/stk command 2563
  151. pair\_style oxrna2/hbond command 2563
  152. pair\_style oxrna2/xstk command 2563
  153. pair\_style oxrna2/coaxstk command 2563
  154. pair\_style oxrna2/dh command 2563
       1. Syntax 2563
       2. Examples 2564
       3. Description 2566
       4. Potential file reading 2567
       5. Restrictions 2567
       6. Related commands 2567
       7. Default 2568
  155. pair\_style pace command 2568
  156. pair\_style pace/extrapolation command 2568
       1. Syntax 2568
       2. Examples 2568
       3. Description 2569
       4. Extrapolation grade 2569
       5. Core repulsion 2570
       6. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2570
       7. Restrictions 2571
       8. Related commands 2571
       9. Default 2571
  157. pair\_style pedone command 2571
       1. Syntax 2571
       2. Examples 2571
       3. Description 2572
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2572
       5. Restrictions 2573
       6. Related commands 2573
       7. Default 2573
  158. pair\_style peri/pmb command 2573
  159. pair\_style peri/lps command 2573
  160. pair\_style peri/ves command 2573
  161. pair\_style peri/eps command 2573
       1. Syntax 2573
       2. Examples 2573
       3. Description 2574
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2575
       5. Restrictions 2576
       6. Related commands 2576
       7. Default 2576
  162. pair\_style pod command 2576
       1. Syntax 2576
       2. Examples 2576
       3. Description 2577
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2577
       5. Restrictions 2578
       6. Related commands 2578
       7. Default 2578
  163. pair\_style polymorphic command 2578
       1. Syntax 2578
       2. Examples 2578
       3. Description 2579
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2583
       5. Restrictions 2583
       6. Related commands 2583
  164. pair\_style python command 2583
       1. Syntax 2583
       2. Examples 2584
       3. Description 2584
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2587
       5. Restrictions 2587
       6. Related commands 2588
       7. Default 2588
  165. pair\_style quip command 2588
       1. Syntax 2588
       2. Examples 2588
       3. Description 2588
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2589
       5. Restrictions 2589
       6. Related commands 2589
  166. pair\_style rann command 2589
       1. Syntax 2589
       2. Examples 2589
       3. Description 2590
       4. Potential file syntax 2590
       5. Formulation 2593
       6. Restrictions 2595
       7. Defaults 2595
  167. pair\_style reaxff command 2595
       1. Syntax 2595
       2. Examples 2596
       3. Description 2596
       4. Control file 2599
       5. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2600
       6. Restrictions 2600
       7. Related commands 2601
       8. Default 2601
  168. pair\_style rebomos command 2601
       1. Syntax 2601
       2. Examples 2601
       3. Description 2601
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2602
       5. Restrictions 2603
       6. Related commands 2603
       7. Default 2603
  169. pair\_style resquared command 2603
       1. Syntax 2603
       2. Examples 2603
       3. Description 2604
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2605
       5. Restrictions 2606
       6. Related commands 2606
       7. Default 2606
  170. pair\_style rheo command 2606
       1. Syntax 2606
       2. Examples 2607
       3. Description 2607
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2607
       5. Restrictions 2607
       6. Related commands 2608
       7. Default 2608
  171. pair\_style rheo/solid command 2608
       1. Syntax 2608
       2. Examples 2608
       3. Description 2608
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2609
       5. Restrictions 2609
       6. Related commands 2609
       7. Default 2609
  172. pair\_style saip/metal command 2609
       1. Syntax 2609
       2. Examples 2610
       3. Description 2610
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2611
       5. Restrictions 2611
       6. Related commands 2612
       7. Default 2612
  173. pair\_style sdpd/taitwater/isothermal command 2612
       1. Syntax 2612
       2. Examples 2612
       3. Description 2612
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2613
       5. Restrictions 2613
       6. Related commands 2613
       7. Default 2614
  174. pair\_style smatb command 2614
  175. pair\_style smatb/single command 2614
       1. Syntax 2614
       2. Examples 2614
       3. Description 2614
       4. Coefficients 2615
       5. Mixing info 2615
       6. Restrictions 2615
       7. Related commands 2615
       8. Default 2615
  176. pair\_style smd/hertz command 2616
       1. Syntax 2616
       2. Examples 2616
       3. Description 2616
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2616
       5. Restrictions 2616
       6. Related commands 2616
       7. Default 2617
  177. pair\_style smd/tlsph command 2617
       1. Syntax 2617
       2. Examples 2617
       3. Description 2617
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2617
       5. Restrictions 2618
       6. Related commands 2618
       7. Default 2618
  178. pair\_style smd/tri\_surface command 2618
       1. Syntax 2618
       2. Examples 2618
       3. Description 2618
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2619
       5. Restrictions 2619
       6. Related commands 2619
       7. Default 2619
  179. pair\_style smd/ulsph command 2619
       1. Syntax 2619
       2. Examples 2619
       3. Description 2619
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2620
       5. Restrictions 2620
       6. Related commands 2620
       7. Default 2620
  180. pair\_style smtbq command 2620
       1. Syntax 2620
       2. Examples 2621
       3. Description 2621
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2624
       5. Restrictions 2624
       6. Citing this work 2625
  181. pair\_style snap command 2625
       1. Syntax 2625
       2. Examples 2625
       3. Description 2625
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2628
       5. Restrictions 2629
       6. Related commands 2629
       7. Default 2629
  182. pair\_style soft command 2629
       1. Syntax 2629
       2. Examples 2629
       3. Description 2630
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2631
       5. Restrictions 2631
       6. Related commands 2631
       7. Default 2631
  183. pair\_style sph/heatconduction command 2631
       1. Syntax 2631
       2. Examples 2631
       3. Description 2632
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2632
       5. Restrictions 2632
       6. Related commands 2632
       7. Default 2632
  184. pair\_style sph/idealgas command 2632
       1. Syntax 2632
       2. Examples 2633
       3. Description 2633
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2633
       5. Restrictions 2633
       6. Related commands 2633
       7. Default 2634
  185. pair\_style sph/lj command 2634
       1. Syntax 2634
       2. Examples 2634
       3. Description 2634
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2634
       5. Restrictions 2635
       6. Related commands 2635
       7. Default 2635
  186. pair\_style sph/rhosum command 2635
       1. Syntax 2635
       2. Examples 2635
       3. Description 2635
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2636
       5. Restrictions 2636
       6. Related commands 2636
       7. Default 2636
  187. pair\_style sph/taitwater command 2636
       1. Syntax 2636
       2. Examples 2636
       3. Description 2637
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2637
       5. Restrictions 2637
       6. Related commands 2637
       7. Default 2637
  188. pair\_style sph/taitwater/morris command 2638
       1. Syntax 2638
       2. Examples 2638
       3. Description 2638
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2638
       5. Restrictions 2639
       6. Related commands 2639
       7. Default 2639
  189. pair\_style lj/spica command 2639
  190. pair\_style lj/spica/coul/long command 2639
  191. pair\_style lj/spica/coul/msm command 2639
       1. Syntax 2639
       2. Examples 2640
       3. Description 2640
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2641
       5. Restrictions 2641
       6. Related commands 2641
       7. Default 2642
  192. pair\_style spin/dipole/cut command 2642
  193. pair\_style spin/dipole/long command 2642
       1. Syntax 2642
       2. Examples 2642
       3. Description 2642
       4. Restrictions 2643
       5. Related commands 2643
       6. Default 2643
  194. pair\_style spin/dmi command 2643
       1. Syntax 2643
       2. Examples 2643
       3. Description 2644
       4. Restrictions 2644
       5. Related commands 2644
       6. Default 2645
  195. pair\_style spin/exchange command 2645
  196. pair\_style spin/exchange/biquadratic command 2645
       1. Syntax 2645
       2. Examples 2645
       3. Description 2645
       4. Restrictions 2647
       5. Related commands 2647
       6. Default 2647
  197. pair\_style spin/magelec command 2648
       1. Syntax 2648
       2. Examples 2648
       3. Description 2648
       4. Restrictions 2648
       5. Related commands 2649
       6. Default 2649
  198. pair\_style spin/neel command 2649
       1. Syntax 2649
       2. Examples 2649
       3. Description 2649
       4. Restrictions 2650
       5. Related commands 2650
       6. Default 2650
  199. pair\_style srp command 2650
  200. pair\_style srp/react command 2650
       1. Syntax 2650
       2. Examples 2651
       3. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2652
       4. Restrictions 2653
       5. Related commands 2653
       6. Default 2653
  201. pair\_style sw command 2653
  202. pair\_style sw/mod command 2653
       1. Syntax 2653
       2. Examples 2654
       3. Description 2654
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2657
       5. Restrictions 2657
       6. Related commands 2658
       7. Default 2658
  203. pair\_style sw/angle/table command 2658
       1. Syntax 2658
       2. Examples 2658
       3. Description 2658
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2661
       5. Restrictions 2662
       6. Related commands 2662
  204. pair\_style table command 2662
       1. Syntax 2662
       2. Examples 2662
       3. Description 2663
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2665
       5. Restrictions 2666
       6. Related commands 2666
       7. Default 2666
  205. pair\_style table/rx command 2666
       1. Syntax 2666
       2. Examples 2666
       3. Description 2666
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2669
       5. Restrictions 2669
       6. Related commands 2669
       7. Default 2669
  206. pair\_style tersoff command 2670
  207. pair\_style tersoff/table command 2670
       1. Syntax 2670
       2. Examples 2670
       3. Description 2671
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2674
       5. Restrictions 2674
       6. Related commands 2674
       7. Default 2674
  208. pair\_style tersoff/mod command 2675
  209. pair\_style tersoff/mod/c command 2675
       1. Syntax 2675
       2. Examples 2675
       3. Description 2676
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2678
       5. Restrictions 2678
       6. Related commands 2678
       7. Default 2678
  210. pair\_style tersoff/zbl command 2679
       1. Syntax 2679
       2. Examples 2679
       3. Description 2679
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2683
       5. Restrictions 2683
       6. Related commands 2683
       7. Default 2683
  211. pair\_style thole command 2684
  212. pair\_style lj/cut/thole/long command 2684
       1. Syntax 2684
       2. Examples 2684
       3. Description 2684
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2686
       5. Restrictions 2686
       6. Related commands 2686
       7. Default 2686
  213. pair\_style threebody/table command 2686
       1. Syntax 2686
       2. Examples 2687
       3. Description 2687
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2689
       5. Restrictions 2690
       6. Related commands 2690
  214. pair\_style tracker command 2690
       1. Syntax 2690
       2. Examples 2691
       3. Description 2691
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2692
       5. Restrictions 2692
       6. Related commands 2692
       7. Default 2692
  215. pair\_style tri/lj command 2692
       1. Syntax 2692
       2. Examples 2693
       3. Description 2693
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2694
       5. Restrictions 2694
       6. Related commands 2694
       7. Default 2694
  216. pair\_style uf3 command 2694
       1. Syntax 2694
       2. Examples 2695
       3. Description 2695
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2697
       5. Restrictions 2697
       6. Related commands 2697
       7. Default 2697
  217. pair\_style ufm command 2698
       1. Syntax 2698
       2. Examples 2698
       3. Description 2698
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2699
       5. Restrictions 2699
       6. Related commands 2700
       7. Default 2700
  218. pair\_style vashishta command 2700
  219. pair\_style vashishta/table command 2700
       1. Syntax 2700
       2. Examples 2700
       3. Description 2701
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2703
       5. Restrictions 2703
       6. Related commands 2703
       7. Default 2703
  220. pair\_style wf/cut command 2704
       1. Syntax 2704
       2. Examples 2704
       3. Description 2704
       4. Restrictions 2705
       5. Related commands 2705
  221. pair\_style ylz command 2705
       1. Syntax 2705
       2. Examples 2706
       3. Description 2706
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2707
       5. Restrictions 2707
       6. Related commands 2707
       7. Default 2707
  222. pair\_style yukawa command 2708
       1. Syntax 2708
       2. Examples 2708
       3. Description 2708
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2709
       5. Restrictions 2709
       6. Related commands 2709
       7. Default 2709
  223. pair\_style yukawa/colloid command 2709
       1. Syntax 2709
       2. Examples 2710
       3. Description 2710
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2711
       5. Restrictions 2711
       6. Related commands 2712
       7. Default 2712
  224. pair\_style zbl command 2712
       1. Syntax 2712
       2. Examples 2712
       3. Description 2712
       4. Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info 2713
       5. Restrictions 2714
       6. Related commands 2714
       7. Default 2714

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 4.286 | | pair\_style | zero command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2714 |
|  | | 4.286.1 | Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2714 |
|  | | 4.286.2 | Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2714 |
|  | | 4.286.3 | Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2714 |
|  | | 4.286.4 | Mixing, shift, table, tail correction, restart, rRESPA info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2715 |
|  | | 4.286.5 | Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2715 |
|  | | 4.286.6 | Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2715 |
|  | | 4.286.7 | Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2715 |
| **5** | **Bond Styles** | | | **2717** |
|  | 5.1 bond\_style bpm/rotational command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2717 |
|  | 5.1.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2717 |
|  | 5.1.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2718 |
|  | 5.1.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2718 |
|  | 5.1.4 Restart and other info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2720 |
|  | 5.1.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2720 |
|  | 5.1.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2720 |
|  | 5.1.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2720 |
|  | 5.2 bond\_style bpm/spring command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2721 |
|  | 5.2.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2721 |
|  | 5.2.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2721 |
|  | 5.2.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2721 |
|  | 5.2.4 Restart and other info . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2723 |
|  | 5.2.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2723 |
|  | 5.2.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2723 |
|  | 5.2.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2723 |
|  | 5.3 bond\_style class2 command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2724 |
|  | 5.3.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2724 |
|  | 5.3.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2724 |
|  | 5.3.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2724 |
|  | 5.3.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2725 |
|  | 5.3.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2725 |
|  | 5.3.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2725 |
|  | 5.4 bond\_style fene command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2725 |
|  | 5.5 bond\_style fene/nm command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2725 |
|  | 5.5.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | | | 2725 |

* + 1. Examples 2725
    2. Description 2725
    3. Restrictions 2726
    4. Related commands 2727
    5. Default 2727
  1. bond\_style fene/expand command 2727
     1. Syntax 2727
     2. Examples 2727
     3. Description 2727
     4. Restrictions 2728
     5. Related commands 2728
     6. Default 2728
  2. bond\_style gaussian command 2728
     1. Syntax 2728
     2. Examples 2728
     3. Description 2729
     4. Restrictions 2729
     5. Related commands 2729
     6. Default 2729
  3. bond\_style gromos command 2729
     1. Syntax 2730
     2. Examples 2730
     3. Description 2730
     4. Restrictions 2730
     5. Related commands 2731
     6. Default 2731
  4. bond\_style harmonic command 2731
     1. Syntax 2731
     2. Examples 2731
     3. Description 2731
     4. Restrictions 2732
     5. Related commands 2732
     6. Default 2732
  5. bond\_style harmonic/restrain command 2732
     1. Syntax 2732
     2. Examples 2732
     3. Description 2732
     4. Restart info 2733
     5. Restrictions 2733
     6. Related commands 2733
     7. Default 2733
  6. bond\_style harmonic/shift command 2733
     1. Syntax 2733
     2. Examples 2733
     3. Description 2734
     4. Restrictions 2734
     5. Related commands 2734
     6. Default 2734
  7. bond\_style harmonic/shift/cut command 2735
     1. Syntax 2735
     2. Examples 2735
     3. Description 2735
     4. Restrictions 2736
     5. Related commands 2736
     6. Default 2736
  8. bond\_style hybrid command 2736
     1. Syntax 2736
     2. Examples 2736
     3. Description 2736
     4. Restrictions 2737
     5. Related commands 2737
     6. Default 2737
  9. bond\_style lepton command 2737
     1. Syntax 2738
     2. Examples 2738
     3. Description 2738
     4. Lepton expression syntax and features 2739
     5. Restrictions 2740
     6. Related commands 2740
     7. Default 2740
  10. bond\_style mesocnt command 2740
      1. Syntax 2740
      2. Examples 2740
      3. Description 2741
      4. Restrictions 2741
      5. Related commands 2741
      6. Default 2741
  11. bond\_style mm3 command 2742
      1. Syntax 2742
      2. Examples 2742
      3. Description 2742
      4. Restrictions 2742
      5. Related commands 2742
      6. Default 2742
  12. bond\_style morse command 2743
      1. Syntax 2743
      2. Examples 2743
      3. Description 2743
      4. Restrictions 2744
      5. Related commands 2744
      6. Default 2744
  13. bond\_style none command 2744
      1. Syntax 2744
      2. Examples 2744
      3. Description 2744
      4. Restrictions 2744
      5. Related commands 2744
      6. Default 2745
  14. bond\_style nonlinear command 2745
      1. Syntax 2745
      2. Examples 2745
      3. Description 2745
      4. Restrictions 2746
      5. Related commands 2746
      6. Default 2746
  15. bond\_style oxdna/fene command 2746
  16. bond\_style oxdna2/fene command 2746
  17. bond\_style oxrna2/fene command 2746
      1. Syntax 2746
      2. Examples 2746
      3. Description 2747
      4. Potential file reading 2748
      5. Restrictions 2749
      6. Related commands 2749
      7. Default 2749
  18. bond\_style quartic command 2749
      1. Syntax 2749
      2. Examples 2749
      3. Description 2750
      4. Restrictions 2751
      5. Related commands 2751
      6. Default 2751
  19. bond\_style rheo/shell command 2751
      1. Syntax 2751
      2. Examples 2752
      3. Description 2752
      4. Restart and other info 2753
      5. Restrictions 2753
      6. Related commands 2753
      7. Default 2753
  20. bond\_style special command 2754
      1. Syntax 2754
      2. Examples 2754
      3. Description 2754
      4. Restrictions 2755
      5. Related commands 2755
      6. Default 2755
  21. bond\_style table command 2755
      1. Syntax 2755
      2. Examples 2755
      3. Description 2755
      4. Restart info 2757
      5. Restrictions 2757
      6. Related commands 2757
      7. Default 2757
  22. bond\_style zero command 2757
      1. Syntax 2757
      2. Examples 2758
      3. Description 2758
      4. Restrictions 2758
      5. Related commands 2758
      6. Default 2758

# Angle Styles 2759

* 1. angle\_style amoeba command 2759
     1. Syntax 2759
     2. Examples 2759
     3. Description 2759
     4. Restrictions 2761
     5. Related commands 2761
     6. Default 2761
  2. angle\_style charmm command 2761

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 6.2.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2761 |
| 6.2.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2761 |
| 6.2.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2761 |
| 6.2.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2762 |
| 6.2.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2762 |
| 6.2.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2762 |
| 6.3 | angle\_style class2 command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2762 |
| 6.4 | angle\_style class2/p6 command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2762 |
|  | 6.4.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2762 |
|  | 6.4.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2763 |
|  | 6.4.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2763 |
|  | 6.4.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2765 |
|  | 6.4.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2765 |
|  | 6.4.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2765 |
| 6.5 | angle\_style cosine command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2765 |
|  | 6.5.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2765 |
|  | 6.5.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2765 |
|  | 6.5.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2765 |
|  | 6.5.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2766 |
|  | 6.5.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2766 |
|  | 6.5.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2766 |
| 6.6 | angle\_style cosine/buck6d command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2766 |
|  | 6.6.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2766 |
|  | 6.6.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2766 |
|  | 6.6.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2766 |
|  | 6.6.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2767 |
|  | 6.6.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2767 |
|  | 6.6.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2767 |
| 6.7 | angle\_style cosine/delta command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2767 |
|  | 6.7.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2767 |
|  | 6.7.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2767 |
|  | 6.7.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2767 |
|  | 6.7.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2768 |
|  | 6.7.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2768 |
|  | 6.7.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2768 |
| 6.8 | angle\_style cosine/periodic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2768 |
|  | 6.8.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2768 |
|  | 6.8.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2769 |
|  | 6.8.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2769 |
|  | 6.8.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2769 |
|  | 6.8.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2770 |
|  | 6.8.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2770 |
| 6.9 | angle\_style cosine/shift command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2770 |
|  | 6.9.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2770 |
|  | 6.9.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2770 |
|  | 6.9.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2770 |
|  | 6.9.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2771 |
|  | 6.9.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2771 |
|  | 6.9.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2771 |
| 6.10 | angle\_style cosine/shift/exp command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2771 |
|  | 6.10.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2771 |
|  | 6.10.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2771 |
|  | 6.10.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2771 |
|  | 6.10.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2772 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 6.10.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2772 |
|  | 6.10.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2772 |
| 6.11 | angle\_style cosine/squared command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2772 |
|  | 6.11.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2772 |
|  | 6.11.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2772 |
|  | 6.11.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2773 |
|  | 6.11.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2773 |
|  | 6.11.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2773 |
|  | 6.11.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2773 |
| 6.12 | angle\_style cosine/squared/restricted command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2774 |
|  | 6.12.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2774 |
|  | 6.12.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2774 |
|  | 6.12.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2774 |
|  | 6.12.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2775 |
|  | 6.12.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2775 |
|  | 6.12.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2775 |
| 6.13 | angle\_style cross command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2775 |
|  | 6.13.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2775 |
|  | 6.13.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2775 |
|  | 6.13.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2775 |
|  | 6.13.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2776 |
|  | 6.13.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2776 |
|  | 6.13.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2776 |
| 6.14 | angle\_style dipole command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2776 |
|  | 6.14.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2776 |
|  | 6.14.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2776 |
|  | 6.14.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2776 |
|  | 6.14.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2777 |
|  | 6.14.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2778 |
|  | 6.14.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2778 |
| 6.15 | angle\_style fourier command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2778 |
|  | 6.15.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2778 |
|  | 6.15.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2778 |
|  | 6.15.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2778 |
|  | 6.15.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2779 |
|  | 6.15.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2779 |
|  | 6.15.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2779 |
| 6.16 | angle\_style fourier/simple command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2779 |
|  | 6.16.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2779 |
|  | 6.16.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2779 |
|  | 6.16.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2780 |
|  | 6.16.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2780 |
|  | 6.16.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2780 |
|  | 6.16.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2780 |
| 6.17 | angle\_style gaussian command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2780 |
|  | 6.17.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2780 |
|  | 6.17.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2781 |
|  | 6.17.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2781 |
|  | 6.17.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2781 |
|  | 6.17.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2781 |
|  | 6.17.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2781 |
| 6.18 | angle\_style harmonic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2782 |
|  | 6.18.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2782 |
|  | 6.18.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2782 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 6.18.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2782 |
|  | 6.18.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2783 |
|  | 6.18.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2783 |
|  | 6.18.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2783 |
| 6.19 | angle\_style hybrid command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2783 |
|  | 6.19.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2783 |
|  | 6.19.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2783 |
|  | 6.19.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2783 |
|  | 6.19.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2784 |
|  | 6.19.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2785 |
|  | 6.19.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2785 |
| 6.20 | angle\_style lepton command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2785 |
|  | 6.20.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2785 |
|  | 6.20.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2785 |
|  | 6.20.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2785 |
|  | 6.20.4 Lepton expression syntax and features . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2786 |
|  | 6.20.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2787 |
|  | 6.20.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2787 |
|  | 6.20.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2787 |
| 6.21 | angle\_style mesocnt command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2788 |
|  | 6.21.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2788 |
|  | 6.21.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2788 |
|  | 6.21.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2788 |
|  | 6.21.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2789 |
|  | 6.21.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2789 |
|  | 6.21.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2789 |
| 6.22 | angle\_style mm3 command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2790 |
|  | 6.22.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2790 |
|  | 6.22.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2790 |
|  | 6.22.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2790 |
|  | 6.22.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2790 |
|  | 6.22.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2790 |
|  | 6.22.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2790 |
| 6.23 | angle\_style none command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2791 |
|  | 6.23.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2791 |
|  | 6.23.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2791 |
|  | 6.23.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2791 |
|  | 6.23.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2791 |
|  | 6.23.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2791 |
|  | 6.23.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2791 |
| 6.24 | angle\_style quartic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2791 |
|  | 6.24.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2791 |
|  | 6.24.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2792 |
|  | 6.24.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2792 |
|  | 6.24.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2792 |
|  | 6.24.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2793 |
|  | 6.24.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2793 |
| 6.25 | angle\_style spica command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2793 |
|  | 6.25.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2793 |
|  | 6.25.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2793 |
|  | 6.25.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2793 |
|  | 6.25.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2794 |
|  | 6.25.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2794 |
|  | 6.25.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2794 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 6.26 angle\_style table command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2794 |
| 6.26.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2794 |
| 6.26.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2794 |
| 6.26.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2795 |
| 6.26.4 Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2796 |
| 6.26.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2796 |
| 6.26.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2796 |
| 6.26.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2797 |
| 6.27 angle\_style zero command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2797 |
| 6.27.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2797 |
| 6.27.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2797 |
| 6.27.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2797 |
| 6.27.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2797 |
| 6.27.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2797 |
| 6.27.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2798 |
| **7** | **Dihedral Styles** | **2799** |
|  | 7.1 dihedral\_style charmm command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2799 |
|  | 7.2 dihedral\_style charmmfsw command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2799 |
|  | 7.2.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2799 |
|  | 7.2.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2799 |
|  | 7.2.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2799 |
|  | 7.2.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2801 |
|  | 7.2.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2801 |
|  | 7.2.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2801 |
|  | 7.3 dihedral\_style class2 command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2801 |
|  | 7.3.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2801 |
|  | 7.3.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2802 |
|  | 7.3.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2802 |
|  | 7.3.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2804 |
|  | 7.3.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2804 |
|  | 7.3.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2804 |
|  | 7.4 dihedral\_style cosine/shift/exp command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2804 |
|  | 7.4.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2805 |
|  | 7.4.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2805 |
|  | 7.4.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2805 |
|  | 7.4.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2806 |
|  | 7.4.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2806 |
|  | 7.4.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2806 |
|  | 7.5 dihedral\_style cosine/squared/restricted command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2806 |
|  | 7.5.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2806 |
|  | 7.5.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2806 |
|  | 7.5.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2806 |
|  | 7.5.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2807 |
|  | 7.5.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2807 |
|  | 7.5.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2807 |
|  | 7.6 dihedral\_style fourier command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2807 |
|  | 7.6.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2807 |
|  | 7.6.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2807 |
|  | 7.6.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2807 |
|  | 7.6.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2808 |
|  | 7.6.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2808 |
|  | 7.6.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2808 |
|  | 7.7 dihedral\_style harmonic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2808 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 7.7.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2808 |
| 7.7.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2809 |
| 7.7.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2809 |
| 7.7.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2809 |
| 7.7.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2810 |
| 7.7.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2810 |
| 7.8 | dihedral\_style helix command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2810 |
|  | 7.8.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2810 |
|  | 7.8.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2810 |
|  | 7.8.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2810 |
|  | 7.8.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2811 |
|  | 7.8.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2811 |
|  | 7.8.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2811 |
| 7.9 | dihedral\_style hybrid command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2811 |
|  | 7.9.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2811 |
|  | 7.9.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2811 |
|  | 7.9.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2812 |
|  | 7.9.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2813 |
|  | 7.9.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2813 |
|  | 7.9.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2813 |
| 7.10 | dihedral\_style lepton command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2813 |
|  | 7.10.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2813 |
|  | 7.10.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2813 |
|  | 7.10.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2813 |
|  | 7.10.4 Lepton expression syntax and features . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2814 |
|  | 7.10.5 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2815 |
|  | 7.10.6 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2815 |
|  | 7.10.7 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2815 |
| 7.11 | dihedral\_style multi/harmonic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2815 |
|  | 7.11.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2815 |
|  | 7.11.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2816 |
|  | 7.11.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2816 |
|  | 7.11.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2816 |
|  | 7.11.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2816 |
|  | 7.11.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2817 |
| 7.12 | dihedral\_style nharmonic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2817 |
|  | 7.12.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2817 |
|  | 7.12.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2817 |
|  | 7.12.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2817 |
|  | 7.12.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2818 |
|  | 7.12.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2818 |
|  | 7.12.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2818 |
| 7.13 | dihedral\_style none command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2818 |
|  | 7.13.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2818 |
|  | 7.13.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2818 |
|  | 7.13.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2818 |
|  | 7.13.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2818 |
|  | 7.13.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2818 |
|  | 7.13.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2819 |
| 7.14 | dihedral\_style opls command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2819 |
|  | 7.14.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2819 |
|  | 7.14.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2819 |
|  | 7.14.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2819 |
|  | 7.14.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2820 |

* + 1. Related commands 2820
    2. Default 2820
  1. dihedral\_style quadratic command 2820
     1. Syntax 2820
     2. Examples 2820
     3. Description 2820
     4. Restrictions 2821
     5. Related commands 2821
     6. Default 2821
  2. dihedral\_style spherical command 2821
     1. Syntax 2821
     2. Examples 2821
     3. Description 2822
     4. Restrictions 2823
     5. Related commands 2823
     6. Default 2823
  3. dihedral\_style table command 2823
  4. dihedral\_style table/cut command 2823
     1. Syntax 2823
     2. Examples 2824
     3. Description 2824
     4. Restart, fix\_modify, output, run start/stop, minimize info 2827
     5. Restrictions 2827
     6. Related commands 2827
     7. Default 2827
  5. dihedral\_style zero command 2827
     1. Syntax 2827
     2. Examples 2827
     3. Description 2828
     4. Restrictions 2828
     5. Related commands 2828
     6. Default 2828

# Improper Styles 2829

* 1. improper\_style amoeba command 2829
     1. Syntax 2829
     2. Examples 2829
     3. Description 2829
     4. Restrictions 2830
     5. Related commands 2830
     6. Default 2830
  2. improper\_style class2 command 2830
     1. Syntax 2830
     2. Examples 2830
     3. Description 2830
     4. Restrictions 2832
     5. Related commands 2832
     6. Default 2832
  3. improper\_style cossq command 2832
     1. Syntax 2832
     2. Examples 2832
     3. Description 2832
     4. Restrictions 2833
     5. Related commands 2833

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 8.3.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2833 |
| 8.4 | improper\_style cvff command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2833 |
|  | 8.4.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2833 |
|  | 8.4.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2833 |
|  | 8.4.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2834 |
|  | 8.4.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2834 |
|  | 8.4.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2834 |
|  | 8.4.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2835 |
| 8.5 | improper\_style distance command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2835 |
|  | 8.5.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2835 |
|  | 8.5.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2835 |
|  | 8.5.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2835 |
|  | 8.5.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2836 |
|  | 8.5.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2836 |
|  | 8.5.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2836 |
| 8.6 | improper\_style distharm command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2836 |
|  | 8.6.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2836 |
|  | 8.6.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2836 |
|  | 8.6.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2836 |
|  | 8.6.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2837 |
|  | 8.6.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2837 |
|  | 8.6.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2837 |
| 8.7 | improper\_style fourier command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2837 |
|  | 8.7.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2837 |
|  | 8.7.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2837 |
|  | 8.7.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2837 |
|  | 8.7.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2839 |
|  | 8.7.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2839 |
|  | 8.7.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2839 |
| 8.8 | improper\_style harmonic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2839 |
|  | 8.8.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2839 |
|  | 8.8.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2839 |
|  | 8.8.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2839 |
|  | 8.8.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2840 |
|  | 8.8.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2840 |
|  | 8.8.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2840 |
| 8.9 | improper\_style hybrid command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2840 |
|  | 8.9.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2840 |
|  | 8.9.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2841 |
|  | 8.9.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2841 |
|  | 8.9.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2842 |
|  | 8.9.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2842 |
|  | 8.9.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2842 |
| 8.10 | improper\_style inversion/harmonic command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2842 |
|  | 8.10.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2842 |
|  | 8.10.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2842 |
|  | 8.10.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2842 |
|  | 8.10.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2843 |
|  | 8.10.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2843 |
|  | 8.10.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2843 |
| 8.11 | improper\_style none command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2844 |
|  | 8.11.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2844 |
|  | 8.11.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2844 |
|  | 8.11.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2844 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 8.11.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2844 |
| 8.11.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2844 |
| 8.11.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2844 |
| 8.12 improper\_style ring command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2844 |
| 8.12.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2844 |
| 8.12.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2845 |
| 8.12.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2845 |
| 8.12.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2846 |
| 8.12.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2846 |
| 8.13 improper\_style sqdistharm command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2846 |
| 8.13.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2846 |
| 8.13.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2846 |
| 8.13.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2846 |
| 8.13.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2847 |
| 8.13.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2847 |
| 8.13.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2847 |
| 8.14 improper\_style umbrella command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2847 |
| 8.14.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2847 |
| 8.14.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2847 |
| 8.14.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2847 |
| 8.14.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2848 |
| 8.14.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2849 |
| 8.14.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2849 |
| 8.15 improper\_style zero command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2849 |
| 8.15.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2849 |
| 8.15.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2849 |
| 8.15.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2849 |
| 8.15.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2849 |
| 8.15.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2850 |
| 8.15.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2850 |
| **9** | **Dump Styles** | **2851** |
|  | 9.1 dump command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.2 dump vtk command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.3 dump h5md command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.4 dump molfile command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.5 dump netcdf command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.6 dump image command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.7 dump movie command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.8 dump atom/adios command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.9 dump custom/adios command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.10 dump cfg/uef command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.10.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2851 |
|  | 9.10.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2854 |
|  | 9.10.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2854 |
|  | 9.10.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2864 |
|  | 9.10.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2864 |
|  | 9.10.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2864 |
|  | 9.11 dump atom/adios command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2864 |
|  | 9.12 dump custom/adios command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2864 |
|  | 9.12.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2864 |
|  | 9.12.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2865 |
|  | 9.12.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2865 |
|  | 9.12.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2865 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 9.12.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2865 |
| 9.13 | dump cfg/uef command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2866 |
|  | 9.13.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2866 |
|  | 9.13.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2866 |
|  | 9.13.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2866 |
|  | 9.13.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2866 |
|  | 9.13.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2866 |
|  | 9.13.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2866 |
| 9.14 | dump h5md command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2867 |
|  | 9.14.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2867 |
|  | 9.14.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2867 |
|  | 9.14.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2867 |
|  | 9.14.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2868 |
|  | 9.14.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2868 |
| 9.15 | dump image command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2868 |
| 9.16 | dump movie command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2868 |
|  | 9.16.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2869 |
| 9.17 | dump\_modify options for dump image/movie . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2870 |
|  | 9.17.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2870 |
|  | 9.17.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2871 |
|  | 9.17.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2872 |
|  | 9.17.4 Image Quality Settings . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2877 |
|  | 9.17.5 Dump\_modify keywords for dump image and dump movie . . . . . . . . . . . . . . . . | 2879 |
|  | 9.17.6 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2882 |
|  | 9.17.7 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2883 |
|  | 9.17.8 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2883 |
| 9.18 | dump\_modify command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2886 |
| 9.19 | dump\_modify command for image/movie options . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2886 |
|  | 9.19.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2886 |
|  | 9.19.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2888 |
|  | 9.19.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2888 |
|  | 9.19.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2898 |
|  | 9.19.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2898 |
|  | 9.19.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2898 |
| 9.20 | dump molfile command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2899 |
|  | 9.20.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2899 |
|  | 9.20.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2899 |
|  | 9.20.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2899 |
|  | 9.20.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2900 |
|  | 9.20.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2901 |
|  | 9.20.6 Default . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2901 |
| 9.21 | dump netcdf command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2901 |
| 9.22 | dump netcdf/mpiio command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2901 |
|  | 9.22.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2901 |
|  | 9.22.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2901 |
|  | 9.22.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2901 |
|  | 9.22.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2902 |
|  | 9.22.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2902 |
| 9.23 | dump vtk command . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2902 |
|  | 9.23.1 Syntax . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2902 |
|  | 9.23.2 Examples . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2902 |
|  | 9.23.3 Description . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2902 |
|  | 9.23.4 Restrictions . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2904 |
|  | 9.23.5 Related commands . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . | 2904 |

9.23.6 Default 2904

**10 Bibliography**

**2905**

**IV Indices and tables**

**2935**

**Index**

**2937**