

lammps教程: OPLS势函数参数设置方法



4 人赞同了该文章

大家好, 我是小马老师。

本文介绍OPLS势函数的设置方法。

lammps力场大体分为两种情况:

一种类似于eam这种势,参数是写到eam力场文件中的,在使用的时候需要下载力场文件,在设 置时不需设置力场参数,只需映射原子类型即可。

另一种力场则不需要力场文件,如lj/cut。这种力场大多使用公式描述原子间相互作用力,这些公 式内嵌在lammps代码中,在设置力场时,不需要下载力场文件,只需要设定公式中的参数即 可。

本文所讲的OPLS属于第二种力场,不需要力场文件,但是需要设置力场参数。

OPLS对应的公式为:

Bond stretching:

$$E_{bond} = \sum_{bonds} K_r (r - r_{eq})^2$$

Angle bending:

$$E_{angle} = \sum_{angles} K_{\theta} (\theta - \theta_{eq})^2$$

 $E(\phi) = \frac{V_1}{2} \left[1 + \cos(\phi + f1) \right] + \frac{V_2}{2} \left[1 - \cos(2\phi + f2) \right] + \frac{V_3}{2} \left[1 + \cos(3\phi + f3) \right]$

Non-bonded:

Torsion:

$$E_{ab} = \sum_{i}^{ona} \sum_{j}^{onb} [q_{i}q_{j}e^{2}/r_{ij} + 4\varepsilon_{ij}(\sigma_{ij}^{12}/r_{ij}^{12} - \sigma_{ij}^{6}/r_{ij}^{6})]f_{ij}$$

$$f_{ij} = 0.5 \text{ if i, j are 1,4; otherwise, } f_{ij} = \sqrt{1.5} \text{ and } f_{ij} = \sqrt{1.5} \text{ and$$

从公式可以看出,OPLS包含了键(bond)、角(angle)、非正常二面角(dihedral或torsion) 以及非键接势(non-bonded)。

在lammps中设置OPLS时,这些势都需要单独设置,这就需要找到与之对应的力场类型和参数。

(1) bond

bond势就是谐振势harmonic,或者势弹簧式,写法为:

```
bond_style harmonic
bond_coeff 5 80.0 1.2
```

(2) angle

angle也是谐振势harmonic, 写法为:

```
angle_style harmonic
angle_coeff 1 300.0 107.0
```

(3) dihedral或torsion

在lammps中,这个势就称为opls势,写法为:

```
dihedral_style opls
dihedral_coeff 1 1.740 -0.157 0.279 0.00
dihedral_coeff 2 0.000 0.000 0.366 0.000
dihedral_coeff 3 0.000 0.000 0.318 0.000
```

(4) non-bonded

非键连接势包含两部分,一部分是lj势,另一部分是库伦势,根据公式可知对应的势为 lj/cut/coul/long, 写法为:

```
pair_style lj/cut/coul/long 10.0 8.0
pair_coeff 1 1 100.0 3.5 9.0
```

在公式中还有这么一句:

 $f_{ij} = 0.5 \text{ if i, j are 1,4; otherwise, } f_{ij} = 1.0$

所以需要设置这个势的权重系数,对应的命令为:

special_bonds lj/coul 0 0 0.5

关于special_bonds命令,后续会出一篇文章详细介绍。

上面例句仅说明使用方法,具体的参数需要查文献获取,下面这两篇文献有部分参数,可自行下 载查看:

Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids.

Frictional dynamics of perfluorinated self-assembled monolayers on amorphous SiO2.

公众号: lammps加油站

编辑于 2021-08-20 22:17

分子动力学模拟 LAMMPS



文章被以下专栏收录



推荐阅读

2.3 HLSL常用函数介绍 #课程内容整体分类预览基本数学

运算幂指对函数与偏导数数据范围 类类型判断类三角函数和双曲线函 数向量和矩阵类光线运算类1D纹理 查找2D纹理查找3D纹理查找立体 纹理查找//详细参考: https://...

苏格拉没有... 发表于TA百人计...

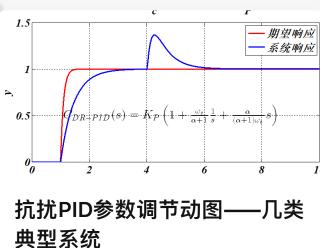
率和loss分析,以及ROC曲线 from __future__ import

InceptionV3详细代码,带准确

absolute_import from __future__ import division from __future__ import print_function import time start_time = time.time() import numpy as np import matp... 初识CV

[Opt] 近端最小化算法

Proximal Minimization Algorithm 是在原问题上添加一个二次项使其 变得严格凸。从而允许我们将一个 线性规划问题转换为一个严格凸的 二次规划问题,常用的二次规划解 法有:内点法、增广拉格朗...



典型系统 Sukung实验室

Gan Pan