



## lammps教程：OPLS势函数参数设置方法

 小马老师

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:

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

Torsion:

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

Non-bonded:

$$E_{ab} = \sum_i \sum_j^{onb} [q_i q_j e^2 / r_{ij} + 4 \epsilon_{ij} (\sigma_{ij}^{12} / r_{ij}^{12} - \sigma_{ij}^6 / r_{ij}^6)] f_{ij}$$

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

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：

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

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

LAMMPS


分子动力学模拟

写下你的评论...



还没有评论，发表第一个评论吧

### 文章被以下专栏收录

 lammps加油站

lammps教程、案例学习

### 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...

InceptionV3详细代码,带准确率和loss分析, 以及ROC曲线

from \_\_future\_\_ import absolute\_import from \_\_future\_\_ import division from \_\_future\_\_ import print\_function import time start\_time = time.time() import numpy as np import matplotlib

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...

Gan Pan

抗扰PID参数调节动图——几类典型系统



—阶阶响应—系统响应

Sukung实验室