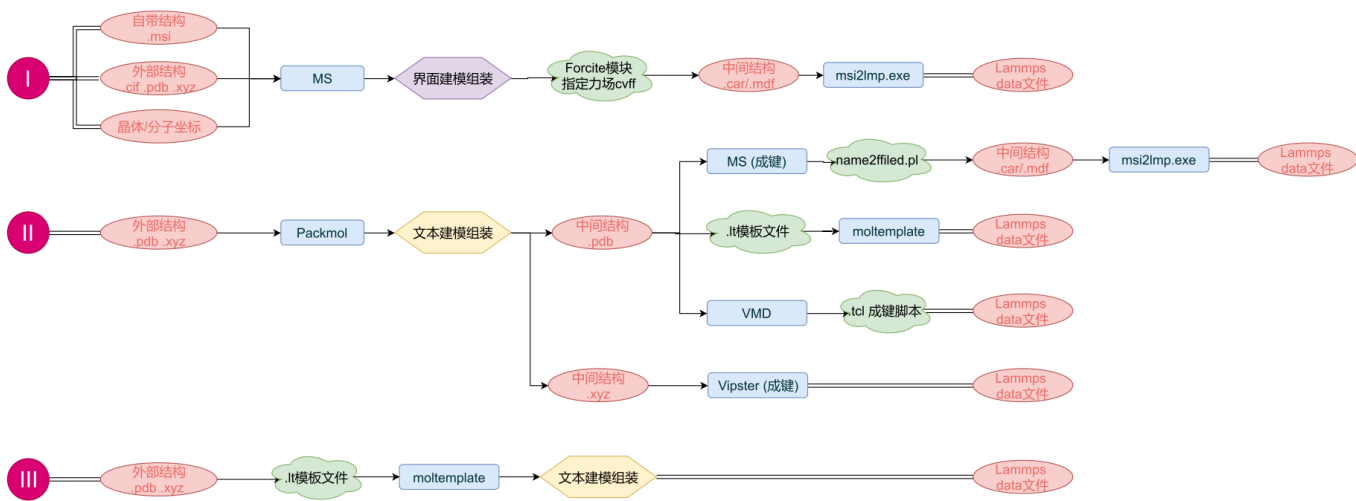


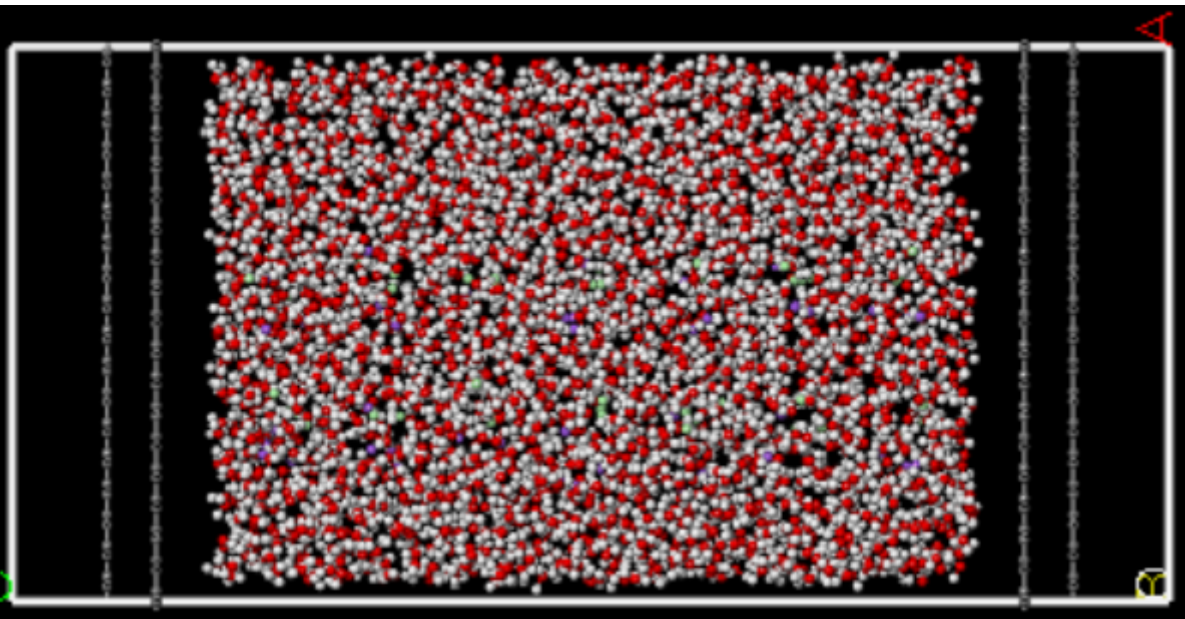
20210211-Lammps data文件建模格式转换进阶：II

在Lammps计算中，复杂模型的组装和格式的转换是一个难点问题，今天给大家介绍一些常用的建模路线图。

下图为三种常用的模型构建策略路线图I、II、III。

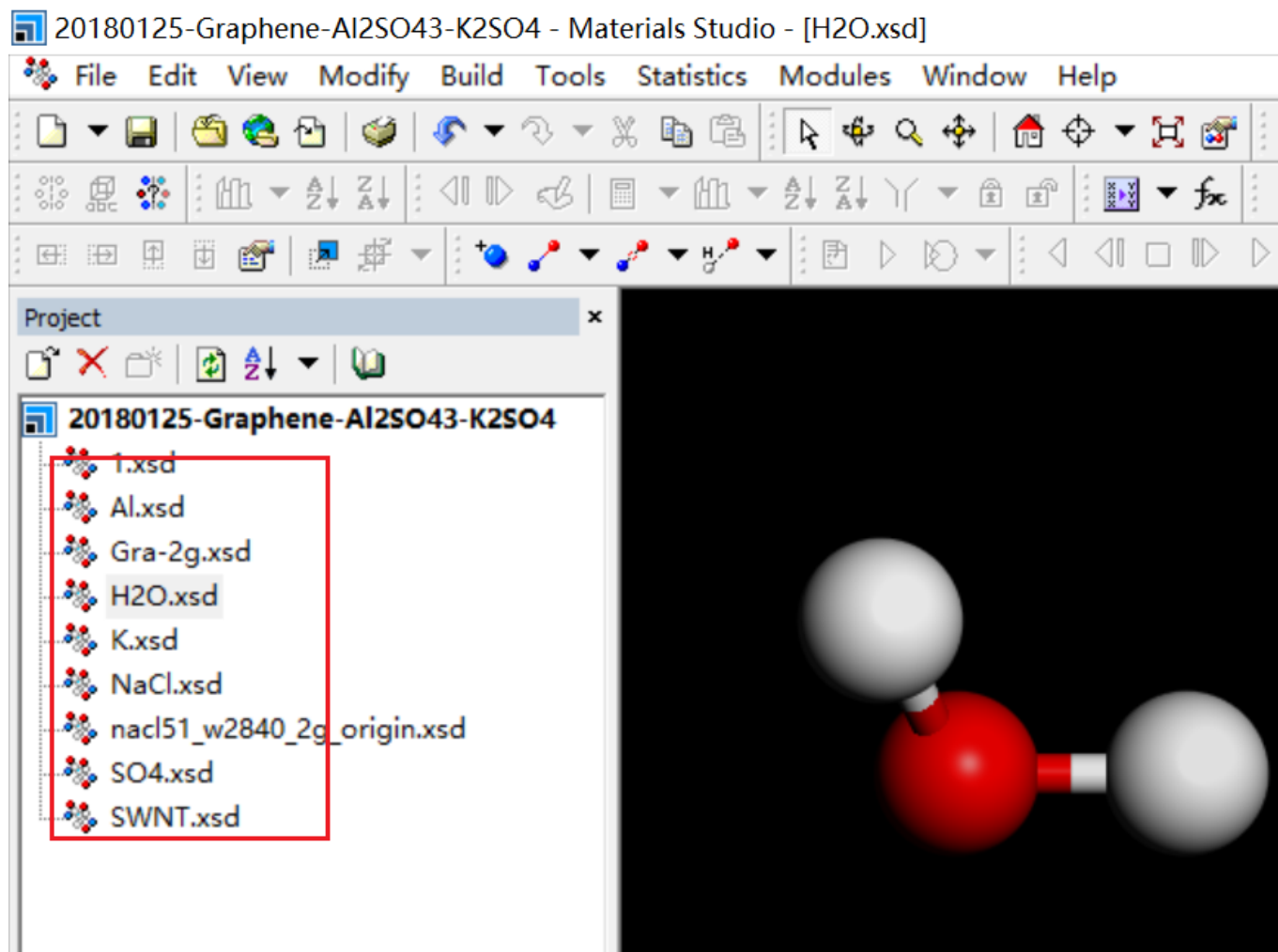


通常情况下路线I能完成许多基本的模型构建和导出，当遇到一些较复杂的模型需要组装时就会显得力不从心了。如下图这种，多组分固液模型组装。

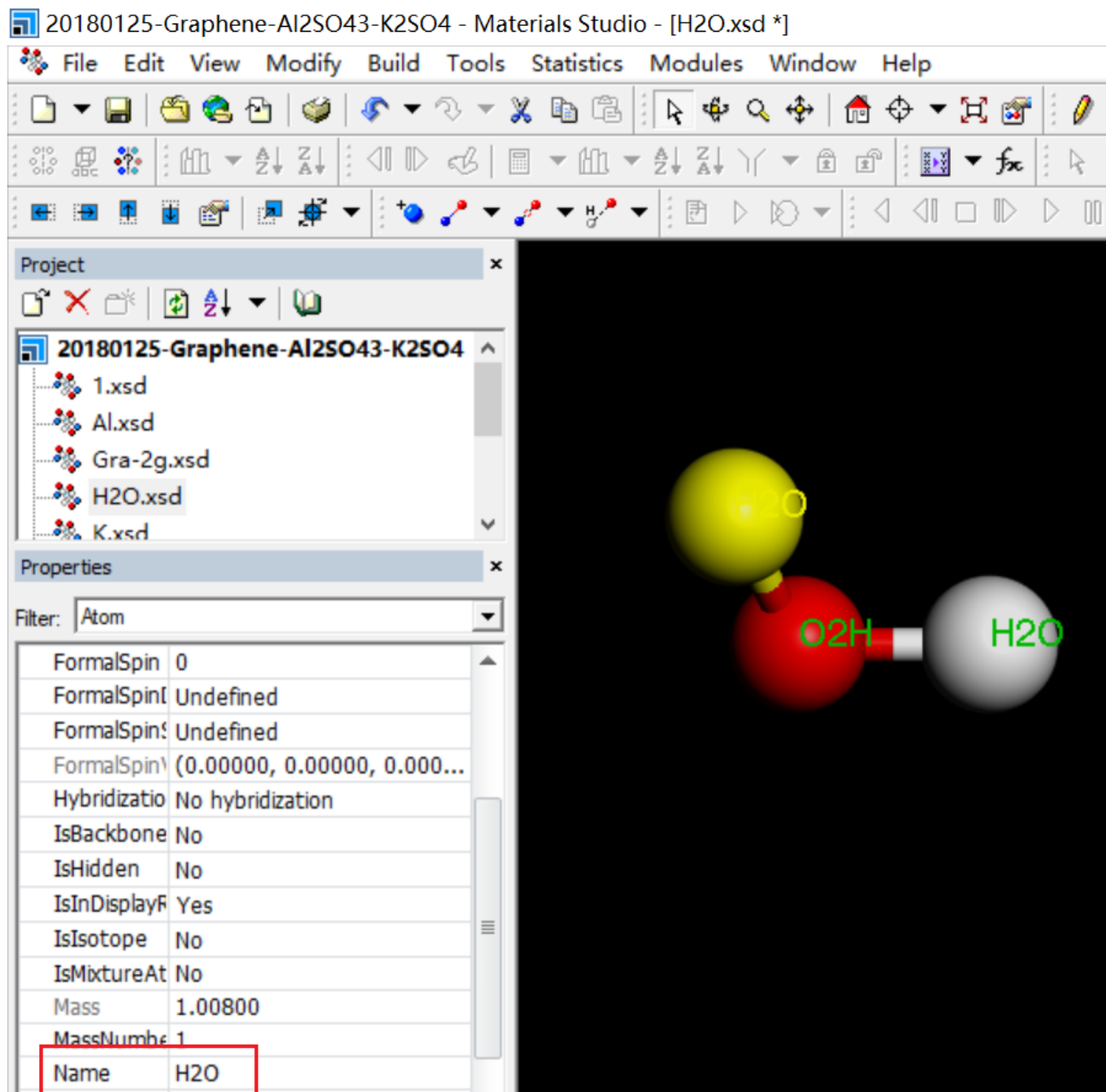


此时，我们需要利用到组装工具软件Packmol，按照路线II完成组装和转化。

1. 在MS中构建好所需要的所有组分结构，导出为.pdb文件。



需要注意的是，导出前需要手动设置每个原子的Name，相同原子类型的设置为相同Name，不同原子类型需要设置为不同Name，此处设置为该路线中的关键步骤。



2. 编写用于Packmol组装的in文件, 利用packmol.exe可执行程序完成组装,得到组装完成结构文件 structure_Gra_Al2SO4_3-0.6M.pdb。

```
# 距离容差, 不同分子中原子间的最小距离2A
tolerance 2.0

# 输入输出文件的格式
filetype pdb

# 输出文件的名字
output structure_Gra_Al2SO4_3-0.6M.pdb

#
structure Gra.pdb
  number 1
  center
```

```

fixed 19.0179 18.45 30.01 0. 0. 0.
end structure

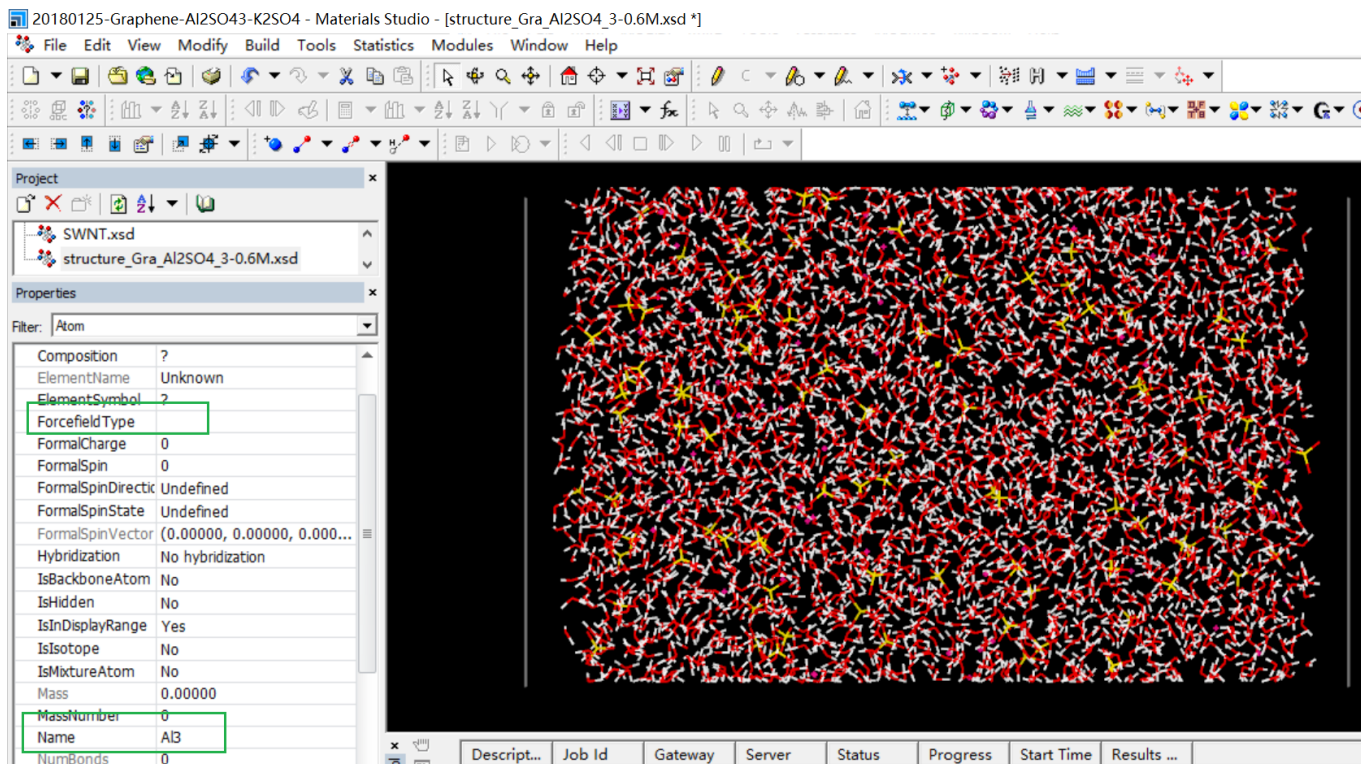
#
structure H2O.pdb
number 2840
inside box 1.0 1.0 1.0 37.5 37.0 59.0
end structure

#
structure Al.pdb
number 60
inside box 1.0 1.0 1.0 37.5 37.0 59.0
end structure

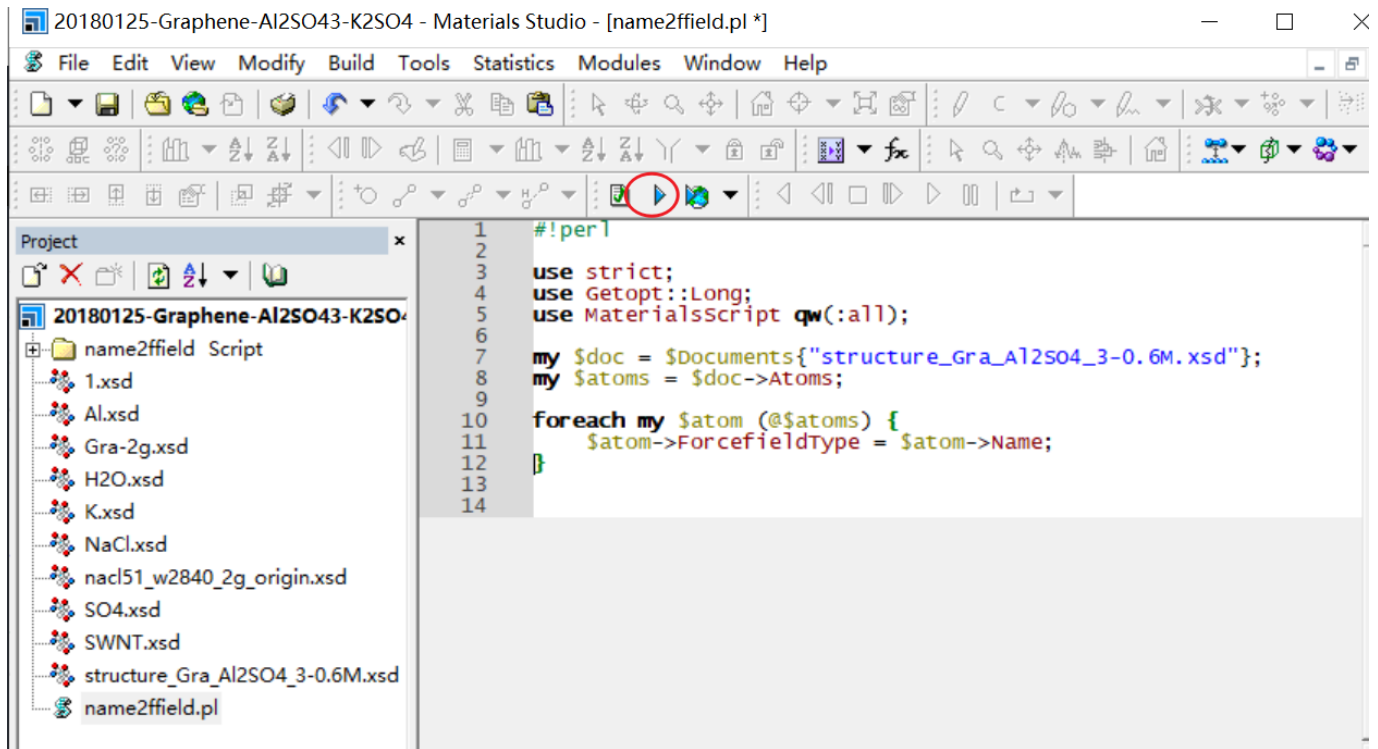
#
structure SO4.pdb
number 90
inside box 1.0 1.0 1.0 37.5 37.0 59.0
end structure

```

3. 将组装完成结构文件structure_Gra_Al2SO4_3-0.6M.pdb重新拖回到MS中。任意选中一个原子，可以发现原子属性中Name栏为预设原子Name，而ForcefiledType力场类型栏为空。



此时我们借助name2ffield.pl脚本将结构中所有原子Name属性复制到ForcefiledType属性。



name2ffield.pl文件内容如下

```

#!/perl

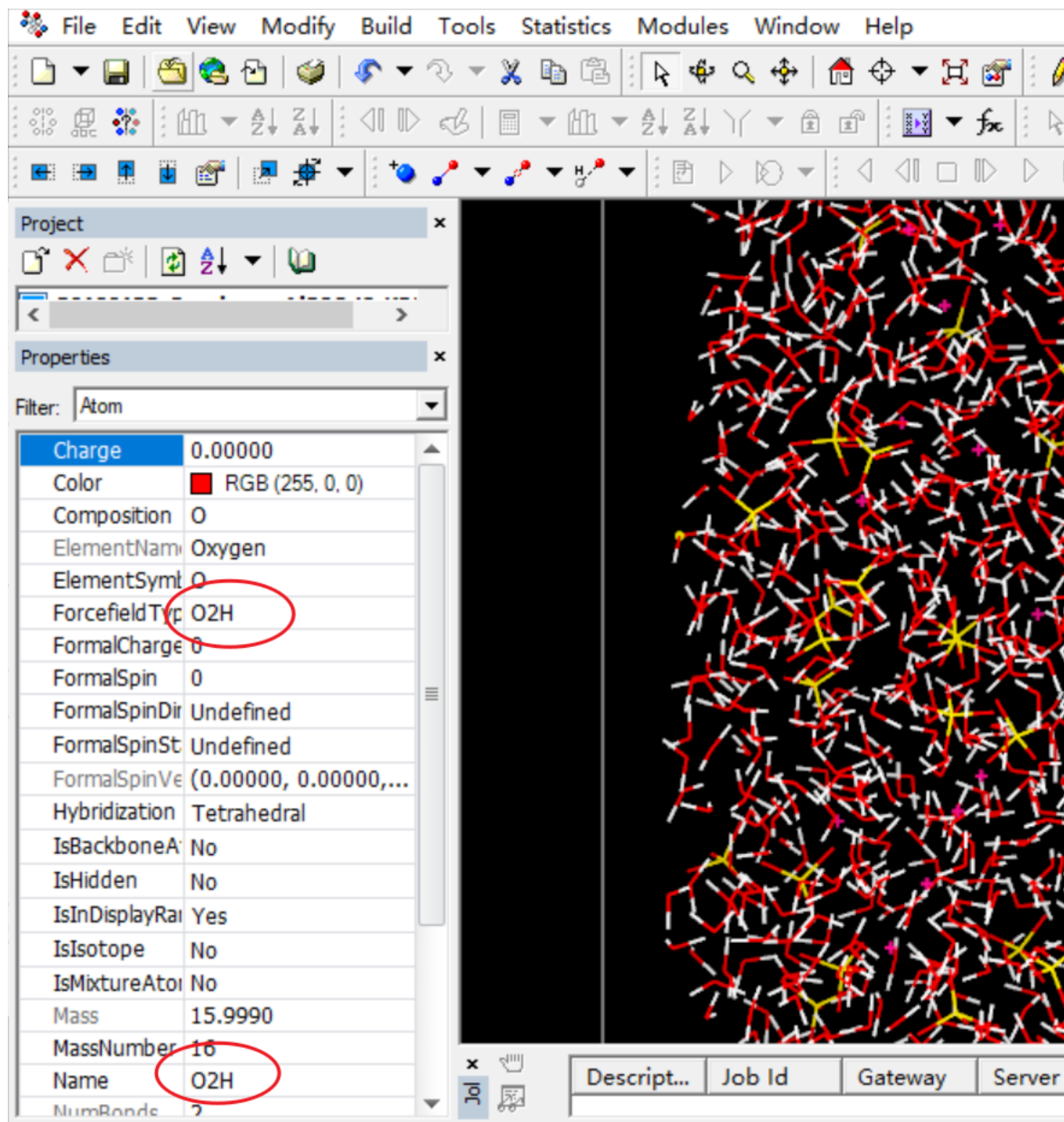
use strict;
use Getopt::Long;
use MaterialsScript qw(:all);

my $doc = $Documents{"structure_Gra_Al2SO4_3-0.6M.xsd"};
my $atoms = $doc->Atoms;

foreach my $atom (@$atoms) {
    $atom->ForcefieldType = $atom->Name;
}

```

name2ffield.pl脚本执行完，可以随意选择其中几个原子检查ForcefiledType力场类型设置是否正确完成。

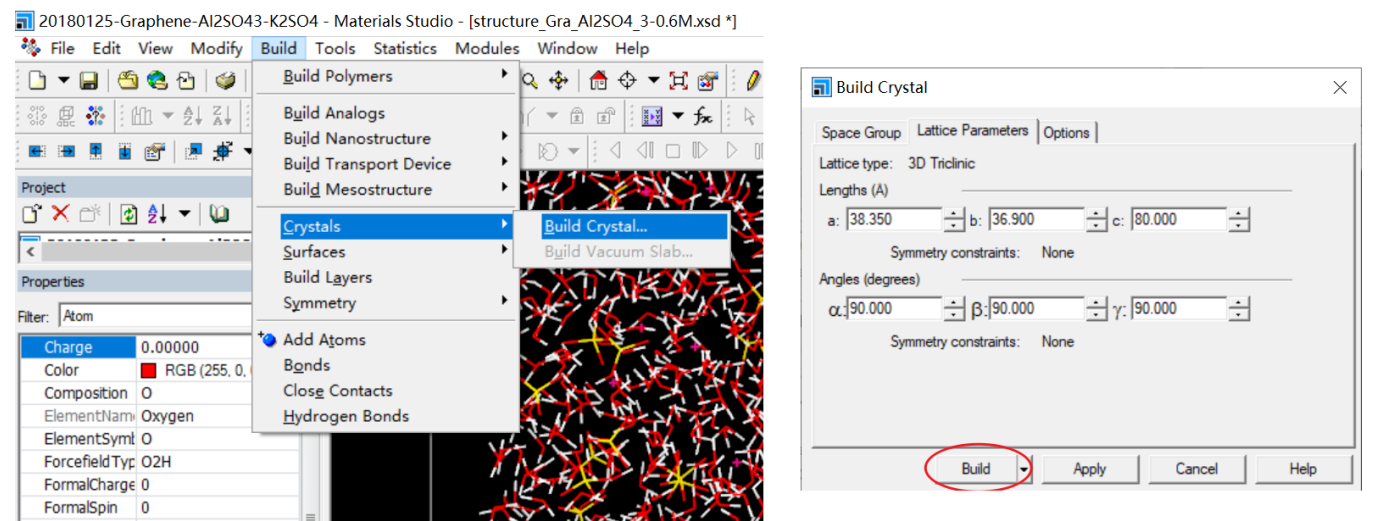


The screenshot shows the LAMMPS GUI with the Properties panel open. The Filter is set to 'Atom'. The Properties table is as follows:

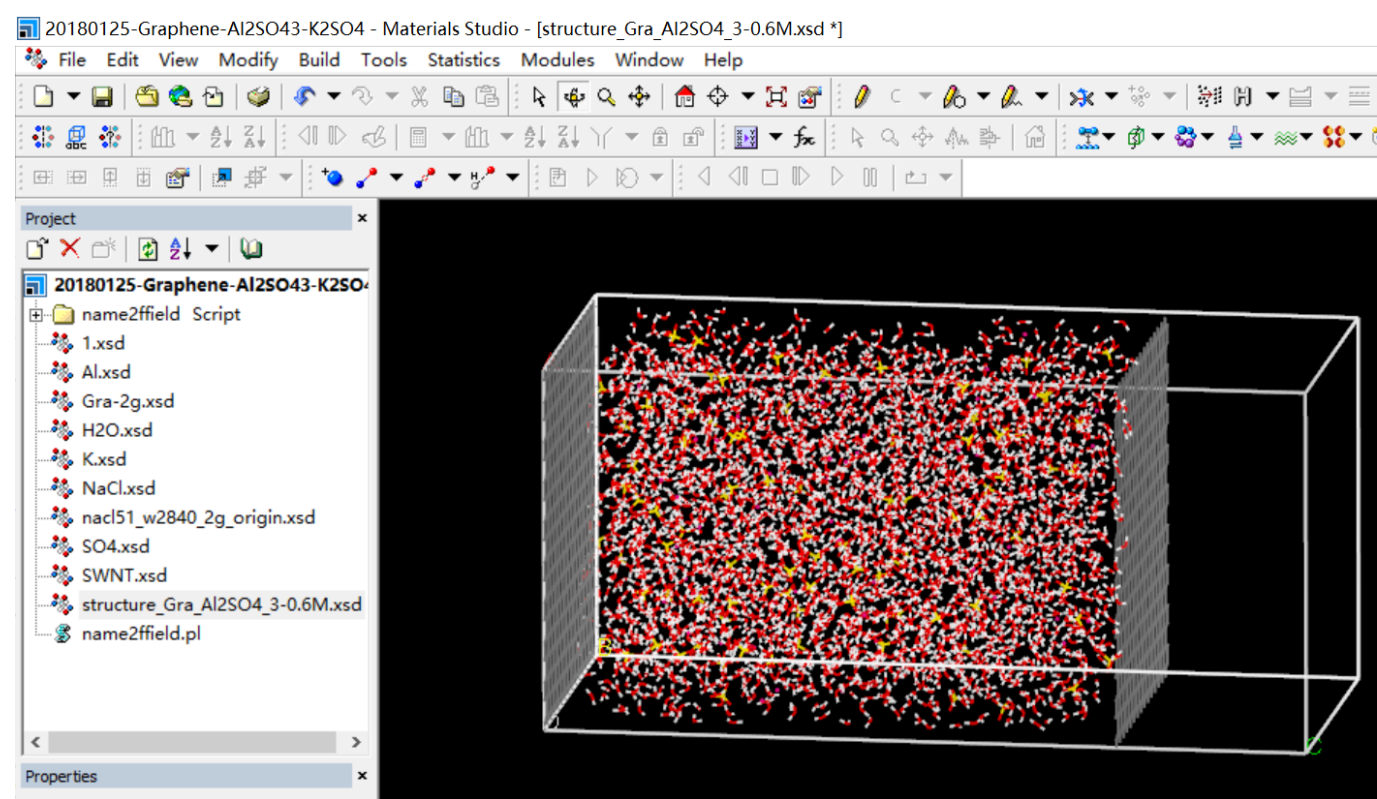
Property	Value
Charge	0.00000
Color	RGB (255, 0, 0)
Composition	O
ElementName	Oxygen
ElementSymbol	O
ForcefieldType	O2H
FormalCharge	0
FormalSpin	0
FormalSpinDir	Undefined
FormalSpinSt	Undefined
FormalSpinVe	(0.00000, 0.00000, ...)
Hybridization	Tetrahedral
IsBackboneA	No
IsHidden	No
IsInDisplayRa	Yes
IsIsotope	No
IsMixtureAto	No
Mass	15.9990
MassNumber	16
Name	O2H
NumBonds	?

The main window shows a molecular simulation with red and yellow atoms on a black background. The bottom status bar includes buttons for 'Descript...', 'Job Id', 'Gateway', and 'Server'.

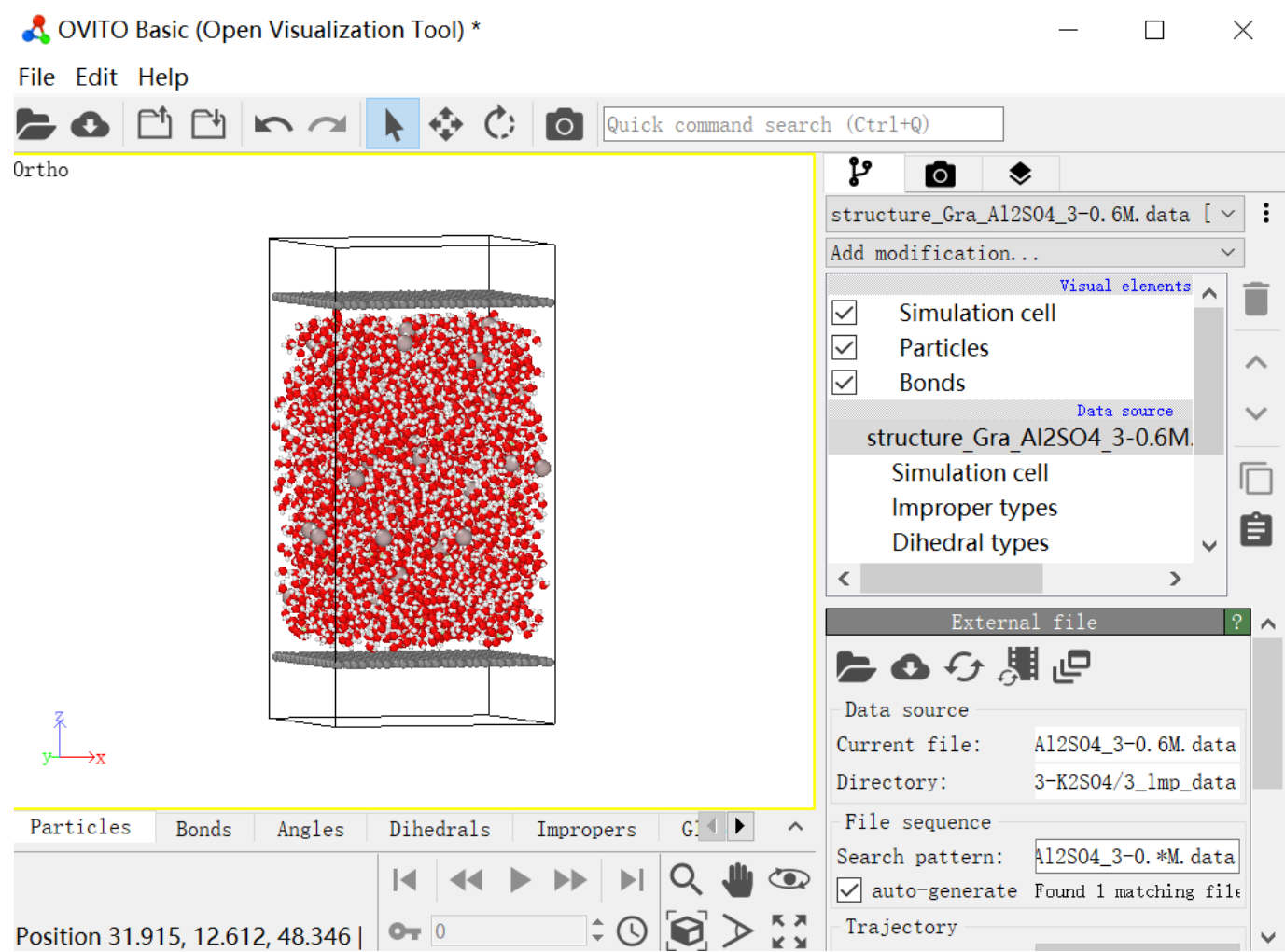
4. ForcefiledType力场类型设置完成后，在MS中添加晶格。



晶格添加完成后模型



5. 导出为为 .car 文件格式，然后利用 `msi2lmp.exe` 小程序来完成格式的转换，即可生成需要的 data 文件 `structure_Gra_Al2SO4_3-0.6M.data`。重复路线I中对应检查。使用Ovito软件查看data文件，可得如下所示结构。



附件：本案例中对应结构文件