

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 算例举要

北京市计算中心 云平台事业部 姜骏

2023.11.23-24

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力建下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

units: 定义单位类型

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

■ 语法: *units style*

■ *units* 命令用来定义模拟过程中使用的单位类型

决定了所有输入脚本、数据文件和所有输出到屏幕、日志文件以及 dump 文件中物理量的单位

*style*可取为

lj or real or metal or si or cgs or electron or micro or nano

金属中一般用 metal

boundary: 设置模拟 box 的边界条件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

- 语法: *boundary* *x y z*

- *boundary*命令设置 box 的边界条件, 参数 *x y z* 分别设
置该维度的边界条件

最基本的边界条件有四种: p f s m

- **p**是周期性边界: 当粒子从一侧飞出, 会从相对应的另一侧再次进入 box,
一般情况下不会发生“lost atoms”(丢失原子) 错误
- **f**是固定边界: 表示 box 的表面在该方向上被固定住, 不因体系压力的变化
发生移动, 如果原子从一个表面飞出, 会提示“lost atoms” 错误
设置*thermo_modify lost*可以允许原子丢失, 否则模拟过程会被终止
- **s**是收缩性边界条件: 表示在该方向上, 盒子的表面会根据体系的压力大小
或原子运动情况发生移动

一般情况下, 盒子会配合原子的移动, 尽量把原子包含在 box 内, 但是当原子速度过快,
位移太大时原子也可能会飞出盒子, 造成“lost atoms” 错误

LAMMPS支持对同一方向的两个边界设置不同的边界条件:

对 *y* 方向下表面设置**f**边界、上表面设置**s**边界, 可以写为:

boundary p fs p

atom_style: 定义模拟过程中原子的类型

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

■ 语法: *atom_style* style

■ *atom_style*命令用来定义模拟过程中原子的类型:

不同的对象粒子所具有的属性不同, 对于某个粒子对象, 粒子不存在的属性就不需要设置, 以便节省内存, 加速运算

style可取为

amoeba or angle or atomic or body or bond or charge or dipole or dpd or edpd or electron or ellipsoid or full or line or mdpd or molecular or oxdna or peri or smd or sph or sphere or bpm/sphere or spin or tdpd or tri or template or hybrid

当style为full时, 其属性包括: 粒子编号, 粒子所属分子的编号, 粒子类别 (atom type), 带电电荷量, 坐标 *x,y,z*

如果粒子是金属粒子, 如 Fe, 粒子 style 为atomic的属性是: 粒子编号, 粒子类别, 坐标 *x,y,z*

variable: 定义一个变量

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算
能量最小化
状态方程
拉伸与压力下的形变
模拟
模拟晶界的形成
拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
裂的原子模拟
长链聚合物行为模拟

模型算例
金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹
碳纳米管的拉伸
硅柱的拉伸裂纹
硅-碳纳米管复合材料
的拉伸
 $ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

■ 语法: *variable name style* ...

*name*是用户定义的变量名

■ *variable*是 LAMMPS 中定义变量的主要命令

在编写**Input**文件时, 用于循环程序, 条件执行, 控制体系运动, 变化模拟参数, 以及分布计算核心, 提高计算效率方面非常有用

*style*是变量类型, 可取为

delete or index or loop or world or universe or uloop or string or format or getenv or file or atomfile or python or timer or internal or equal or vector or atom

常用的变量类型:

■ *index*: 常搭配*next*命令使用

E.g.: *variable x index 12 14 19 15 17*

■ *loop*: 与*index*的作用相同, 不同的是*index*后跟的字符串需要一一列出, 而*loop*后面只需要写一个 *n* 即可

比如*variable x loop 140* 代表了从 1 到 140 的列表, 不需要像*index*一样一一列出

lattice: 定义供其它命令使用的晶格

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

- 语法: *lattice style scale keyword* ...

- *lattice*命令定义各式各样的晶格

*lattice*在 LAMMPS 中的两种应用方式:

- 1 利用 *create_atoms* 命令在模拟单元的晶格格点上创建原子
create_atom 命令是给晶格格点原子位置上分配不同的原子类型
- 2 被 *create_box*, *region*, *velocity* 等命令用作距离单位

- LAMMPS 中, 晶格仅仅是空间中点的集合
模拟对象由最小重复单元(初基原胞)决定

最小重复单元在所有维度中无限被复制

lattice: 定义供其它命令使用的晶格 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算
能量最小化
状态方程
拉伸与压力下的形变
模拟
模拟晶界的形成
拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟
长链聚合物行为模拟

模型算例
金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹
碳纳米管的拉伸
硅柱的拉伸裂纹
硅-碳纳米管复合材料
的拉伸
 $ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

style可取为

`none` or `sc` or `bcc` or `fcc` or `hcp` or `diamond` or `sq` or `sq2` or `hex` or `custom`

scale ¹: 对于除了 L-J units 外的所有其他单位, **scale** 是以距离为单位的晶格常数 (lattice constant in distance units)

keyword可取为

`origin` or `orient` or `spacing` or `a_1` or `a_2` or `a_3` or `bias`

*lattice*命令需要与模拟维度保持一致:

- `style sc` or `bcc` or `fcc` or `hcp` or `diamond` 被用于 3D 问题
- `style sq` or `sq2` or `hex` 被用于 2D 问题

E.g:

lattice `fcc` 4.05

表示晶格类型是 `fcc`, 晶格常数为 4.05, 单位是 Å

¹ `scale`表示的标度关系: scale factor between lattice and simulation box

region: 定义空间几何区域

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压应力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

- 语法: *region* ID style keyword ...

ID: 用户为区域命的名

style可取为delete or block or cone or cylinder or ellipsoid or plane or prism or sphere or union or intersect

- delete: 没有参数
- block: xlo xhi ylo yhi zlo zhi 是三个维度上的最小值和最大值
- cone: dim c1 c2 radlo radhi lo hi

举例如下

lattice fcc 4.05

region box1 block 0 30 0 30 0 30

创建一个名字为 box1 的block, 其中 x, y, z 方向上的长度均为 30 倍的晶格常数

注意: 这里的 30 是 30 倍的意思, 实际长度为 30 乘以 4.05 Å

如果想要让 30 代表实际长度, 即让其单位为 Å, 则只需要在后面加上units box 即可:

region box1 block 0 30 0 30 0 30 *units* box

create_box: 创建一个有限区域

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

■ 语法: *create_box N region-ID keyword ...*

■ 该命令还固定了该模拟区域中原子类型

N: 本次模拟使用的原子种类数

region-ID: 用来模拟的区域的 ID

*keyword*可取为

bond/types or angle/types or dihedral/types or

improper/types or extra/bond/per/atom or

extra/angle/per/atom or extra/dihedral/per/atom or

extra/improper/per/atom or extra/special/per/atom

举例如下

在模拟盒子 box1 中添加一类原子

create_box 1 box1

create_atoms和mass

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

- *create_atoms*: 在指定区域内填充一定数量的原子

语法: *create_atoms type style keyword ...*

其中*type*与后面定义的模拟原子中的信息 (*mass*) 对应

举例如下

在整个模拟区域中添加类型为 1 的原子 (即添加 Al 原子)

create_atoms 1 *region whole*

模拟环境中的原子信息

mass 1 26.981 # Al

mass 2 55.845 # Fe

- *mass*: 为某一种或几种类型的原子设置质量

*pair_style*和*pair_coeff*

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\cdot 8\cdot Y_2O_3$ 的

均方位移

设置势函数

金属中常用的势函数是 EAM 势函数

* * 是通配符: 意思是使原子之间存在相互作用²

举例如下

pair_style eam/alloy

pair_coeff * * Al99.eam.alloy Al

其中 Al99.eam.alloy 是势函数的名称

不同势函数后面的*pair_coeff*写法不同

EAM 势函数需要在后面写出所有原子的名称, 且写的顺序要和*mass*中定义的顺序一一对应

²假如体系中有两类原子, Al 和 Fe 原子, 这个通配符的作用就是使 Al 原子与 Al 原子相互作用, Fe 原子与 Fe 原子相互作用, Al 原子和 Fe 原子相互作用

group: 对原子分组

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

- 分组后的原子会有一个 group-ID, group-ID 将被用到 *fix*, *compute*, *dump* 等命令中

如 *fix* 命令中的第二个参数就是 group-ID

fix ID group-ID style_name keyword ...

```
fix 1 water npt temp 300.0 300.0 100.0 iso 0.0 0.0 1000.0
```

- 即使不对原子进行分组, LAMMPS 也会设置一个默认的原子组: *all*, 也就是把所有的原子全部划分到 *all* 组内
例如对系统所有原子进行温度初始化, 可以使用下面的语句, 其中 *all* 就是默认的 group-ID:

```
velocity all create 300.0 300.0 4928459
```

常用的分组方式有以下几种:

- 1 配合 *region* 使用, 把某一区域的原子归入到一个组中
例如在纳米铜的拉伸时, 需要一端固定, 另一端施加一定的速度进行拉伸, 这就需要把 Cu 原子划分为三个组:

group: 对原子分组 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

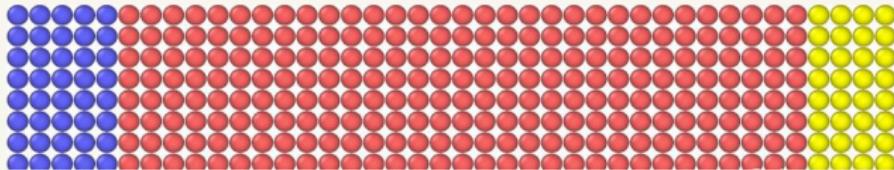
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移



- left: 固定组
- right: 速度加载组
- mobile: 中间组

group 命令配合 *union* 关键字可实现两个组的合并:

例如 left 和 right 组合并为 boundary 组, 可以写成:

group boundary union left right

group 命令配合 *subtract* 关键字可实现减法操作:

所有原子减去 boundary 原子即为中间 mobile 原子, 可以写为:

group mobile subtract all boundary

Cu 拉伸建模全部代码如下:

group: 对原子分组 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```

#模型基本设置
units          metal
dimension      3
boundary       p s p
neighbor       0.3 bin
neigh_modify   delay 0
timestep       0.001

#设置晶格参数, 生成box
lattice        fcc 3.61
region         box block 0 20 0 5 0 5
create_box     3 box
create_atoms   1 box

#设置Cu原子质量
mass           1 64
mass           2 64
mass           3 64

#设置left和right区域, 以此region设置group
region         left block INF 2 INF INF INF INF
group          left region left
set            group left type 2
region         right block 18 INF INF INF INF INF
group          right region right
set            group right type 3

#group组加减操作
group          boundary union left right
group          mobile subtract all boundary

```

group: 对原子分组 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
#保存模型数据  
write_data Cu.data
```

2 配合 type 命令，可以将多种类型的原子归为一组

```
# 将原子类型为 3 和 4 的原子全部归入到 water 组
```

```
group water type 3 4
```

3 配合原子 id 可将特定的原子归入到一组

```
#原子id为10、25、50的三个原子归入到sub组
```

```
group sub id 10 25 50
```

```
#原子id从500到1000的全部原子归入到sub组
```

```
group sub id 500:1000
```

```
#原子id为100、110、120 ... 10000的原子归入到sub组
```

```
group sub id 100:10000:10
```

```
#原子id小于或等于150的原子归入到sub组
```

```
group sub id <= 150
```

注意: LAMMPS 最多支持 32 个 group(包含 all 组)

如果定义的组过多，可将不再使用的组删除：

```
group boundary delete
```

set: 改变原子类型

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化
状态方程
拉伸与压力下的形变
模拟
模拟晶界的形成
拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟
长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹
碳纳米管的拉伸
硅柱的拉伸裂纹
硅-碳纳米管复合材料
的拉伸
 $ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

■ 改变原子类型，可用来为不同区域设置不同颜色

特别是在高熵合金建模过程中

以下实例是在高熵合金建模中，包含的命令

```
set type type_ID type/ratio type_new fraction seed
```

- type_ID 是需要被替换的原子类型
- type_nea 是将要转换的新原子类型
- fraction 是新原子类型占初始原子类型的比例
- seed 为随机种子

set: 改变原子类型 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
# 初始化
units      metal
boundary   p p p
atom_style atomic
timestep   0.001

# 建模
lattice    fcc 3.56
region     box block 0 20 0 20 0 20
create_box  5 box
create_atoms 1 box

#将type为1的原子转换为其他原子
set        type 1 type/ratio 2 0.2 12333
set        type 1 type/ratio 3 0.5 12333
set        type 1 type/ratio 4 0.5 12333
set        type 3 type/ratio 5 0.5 12333
```

```
#设置原子类型
mass      1 27 #Al
mass      2 56 #Fe
mass      3 28 #Si
mass      4 64 #Cu
mass      5 24 #Mg
```

write_data和timestep

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

- ***write_data***: 保存 data 文件
在ovitio中可视化后可用于验证模型是否正确
举例如下

write_data Al_model.xyz

- ***timestep***: 设置模拟的时间步长

金属中一般是在atomic单位制下，所以*timestep*的单位一般是 ps

举例如下

timestep 0.001

这里设置的是 0.001ps，也就是 1fs

velocity: 创建初始温度

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算
能量最小化
状态方程
拉伸与压力下的形变
模拟
模拟晶界的形成
拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟
长链聚合物行为模拟

模型算例
金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹
碳纳米管的拉伸
硅柱的拉伸裂纹
硅-碳纳米管复合材料
的拉伸
 $ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

- *velocity* group-ID style keyword ...

- *velocity* 用来创建初始温度，或者理解为原子组创建初始速度³

group-ID: 即将改变速度的原子组的 ID

style 可取为

create or set or scale or ramp or zero

create 后面要跟用户指定的初始温度 temp seed (其中 temp = temperature value (temperature units))

举例如下

velocity all create 300 12345

all 是 LAMMPS 的关键字，表示所有原子，也可以改成 group-ID
create 300 意思是创建初始温度为 300K

后面的 12345 是随机种子

³LAMMPS 中温度的变化就是对应了速度的变化

fix

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

■ 语法: `fix` ID group-ID `style` keyword ...

ID: user-assigned name for the fix

group-ID: ID of the group of atoms to apply the fix to

`style`: one of a long list of possible style names

可取为

`nvt` or `npt` or `nph`

args: arguments used by a particular style

举例如下

```
fix 1 all npt temp 300 300 0.1 iso 0 0 1 drag 1
```

- 1 是该 `fix` 命令的 ID
- `all` 是对所有原子施加后面的条件的拉伸
- `npt` 是等温等压系综

fix (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化
状态方程
拉伸与压力下的形变
模拟
模拟晶界的形成
拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟
长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹
碳纳米管的拉伸
硅柱的拉伸裂纹
硅-碳纳米管复合材料
的拉伸
 $ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

- **temp**是设置温度的关键字

`temp 300 300 0.1` 命令中

第一个参数 300 是**初始温度**

第二个参数 300 是**截止温度**

第三个参数 0.1 是温度的阻尼系数，设置它是使其在升温或者降温过程中不会出现太大的波动⁴

- **iso**是控压方式，因为设置的是**npt**系综，所以温度和压力必须设置

其中**iso**是对 x,y,z 三个方向进行联合控压 (耦合控压)⁵

与之相对的是**aniso**，是非耦合控压 (x,y,z 三个方向不是同时改变)

iso后跟的是初始压强，结束压强，和阻尼系数 (为了使压强在增加或者降低过程中不会出现太大波动)

⁴一般说来阻尼系数是 100 倍的**timestep**

⁵在控压时要改变模拟盒子的大小， x,y,z 三个方向同时改变

thermo和thermo_style

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算
能量最小化
状态方程
拉伸与压力下的形变
模拟
模拟晶界的形成
拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟
长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹
碳纳米管的拉伸
硅柱的拉伸裂纹
硅-碳纳米管复合材料
的拉伸
 $ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

设置输出信息/格式

■ *thermo N*

N: output thermodynamics every *N timesteps*

■ *thermo_style style*

*style*可取为

one or multi or yaml or custom

args: list of arguments for a particular style

thermo和thermo_style (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

举例如下

`thermoa 1000`

`thermo_style custom step lx ly lz press pxx pyy pzz pe temp`

`thermoa 1000`: 每 1000 步在屏幕上输出一次

`thermo_style`后面是在屏幕上输出的信息:

`custom`后的内容就是在屏幕上输出的, 可以看到

输出的运行步数`step`: 三个方向上的长度 `lx`, `ly`, `lz`

模拟体系的压力`press`: 三个方向上的压力 `pxx`, `pyy`, `pzz`

`pe`是模拟体系的势能

`temp`是模拟体系的温度

thermo和thermo_style (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

Step	Lx	Ly	Lz	Press	Pxx	Pyy	Pzz	PotEng	Temp						
	0	30	30	30	30	30	30	30	30	300	300	300	300	300	300
1000	31.247051	31.247051	31.247051		844.86946	1651.9569	1276.631	-393.87948	-5346.9285	915.76761					
2000	31.055862	31.055862	31.055862		63.430544	-1165.6913	-813.36235	2169.3453	-5409.8216	705.53594					
3000	30.847053	30.847053	30.847053		873.6332	-38.418358	2268.6951	398.62282	-5473.356	603.96711					
4000	30.761916	30.761916	30.761916		-770.99846	-2535.7836	3043.3429	-2820.5547	-5514.4684	492.84737					
5000	30.665577	30.665577	30.665577		785.44852	-1409.2211	5382.2478	-1616.7052	-5541.1986	483.27386					
6000	30.627756	30.627756	30.627756		23.859788	3.598567	4147.6726	-4082.8838	-5561.848	348.59754					
7000	30.576061	30.576061	30.576061		136.69586	477.39813	1592.1505	-1659.4611	-5576.1724	311.59968					
8000	30.561422	30.561422	30.561422		-688.73485	-126.25124	623.12427	-2539.8776	-5585.8797	289.86347					
9000	30.547894	30.547894	30.547894		61.599717	559.55139	1089.4184	-1464.1706	-5589.6741	276.95634					
10000	30.547769	30.547769	30.547769		326.98976	693.60415	1761.2669	-1473.9017	-5586.6684	274.99357					
11000	30.549131	30.549131	30.549131		948.89337	1586.8476	1961.5141	-724.88157	-5582.9522	298.49948					
12000	30.554056	30.554056	30.554056		839.9552	1657.8904	1858.2974	-987.52218	-5582.1486	327.29522					
13000	30.557989	30.557989	30.557989		30.557989	837.43659	1835.4887	2449.1955	-972.3744	-5580.2362	315.91215				
14000	30.55584	30.55584	30.55584		135.75546	343.99918	1508.7043	-1445.4371	-5584.3195	302.17209					
15000	30.549933	30.549933	30.549933		92.396682	481.81855	1547.4539	-1752.6824	-5586.7127	284.21491					
16000	30.553996	30.553996	30.553996		-181.37964	442.78513	1284.635	-2191.559	-5586.6499	288.31933					
17000	30.548285	30.548285	30.548285		691.61604	1099.487	2135.267	-1159.9859	-5584.3628	292.61351					

可以看到最后一行是温度，在模拟开始时温度为 300K，由于前面 `fix` 命令中设置了 `temp 300 300 0.1`，所以截止温度也是 300K，中间会有升温和降温过程，如果最终温度没到 300K，则可能是运行的步数不够。

dump: 设置输出

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

- 语法: *dump* ID group-ID *style N* file attribute1 attribute2 ...

ID: user-assigned name for the dump

group-ID: ID of the group of atoms to be dumped

style 可取为

atom or atom/adios or atom/gz or atom/zstd or
atom/mpiio or cfg or cfg/gz or cfg/zstd or cfg/mpiio or
cfg/uef or custom or custom/gz or custom/zstd or
custom/mpiio or custom/adios or dcd or grid or grid/vtk or
h5md or image or local or local/gz or local/zstd or molfile or
movie or netcdf or netcdf/mpiio or vtk or xtc or xyz or
xyz/gz or xyz/zstd or xyz/mpiio or yaml

dump: 设置输出 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

N: dump on timesteps which are multiples of *N*

file: name of file to write dump info to

attribute1, attribute2, ...: list of attributes for a particular
style

举例如下

dump 1 all custom 1000 Al.xyz type *x y z*

其中

1 是用户指定的*dump*名字

all是关键字，对所有的原子施加后面的操作

custom是自定义输出

1000 是每 1000 步输出一次，输出到后面的 Al.xyz 文件中，该文件中输出的信息有*type*(原子类型)，
和 *x, y, z* 坐标

整个过程中的所有信息保存在log.lammps文件中

LAMMPS 一般计算流程

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化
状态方程
拉伸与压力下的形变模拟
模拟晶界的形成
拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟
长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹
碳纳米管的拉伸
硅柱的拉伸裂纹
硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

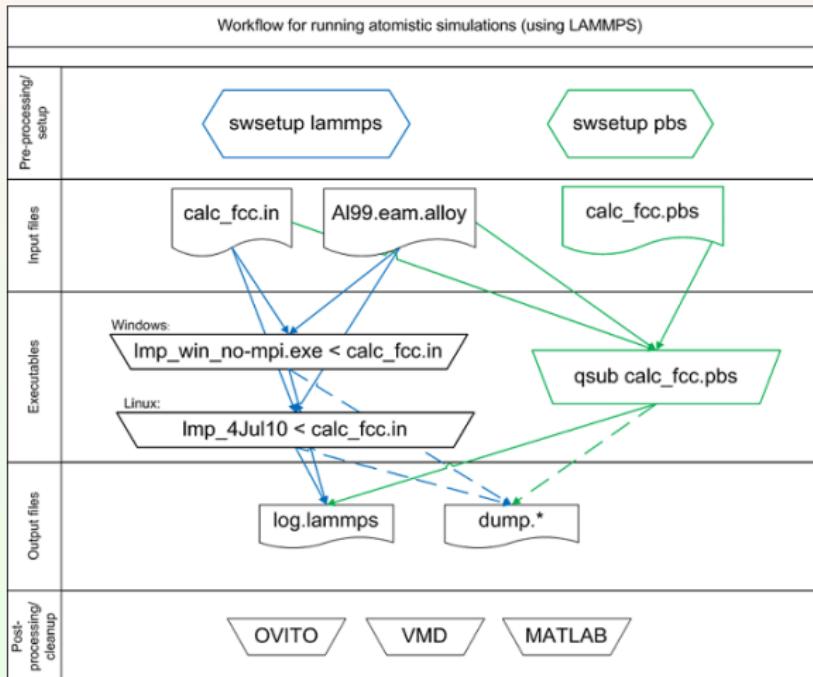


Fig.: The general workflow for running molecular dynamics simulations using LAMMPS.

LAMMPS 的输入参数说明

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
# Find minimum energy fcc configuration
# Mark Tschopp, 2010
```

- *#* 开头的部分表示注释，LAMMPS 不作任何处理

```
# ----- Initialize Simulation -----
clear
units metal
dimension 3
boundary p p p
```

- *clear*: 清除全部内存信息
- *unit*: 设定模拟的单位 (*metal* 表示选择 Å 和 eV 为单位)
- *dimension*: 设定模拟维度 : 3 表示三维模拟
- *boundary p p p*: 表示在 *x-,y-,z-*方向采用周期性边界条件
 - p: 周期性边界条件 (periodic)
 - f: 非周期性固定边界条件 (fixed)
 - s: 非周期性包覆边界条件 (shrink-wrapped)
 - m: 非周期性包覆最小值边界条件 (minimum value)

LAMMPS 的输入参数说明

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压应力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
atom_style atomic
atom_modify map array
```

- *atom_style*: 设置计算粒子类型 : *atomic*表示普通原子类型

在反应力场计算中, *atom_style*选用*charge*, 而*units*选用*full*, 即反应力场中需要考虑电荷平衡问题

- *atom_modify*: *map array*: 表示设置和定义某些存储原子的属性

语法规则: *atom_modify keyword value*

keyword: *id / map / first*

- *id value=yes or no*: 设置是否储存每一个原子的 ID(序号) 默认为 yes
- *map value=yes or array or hash*: 设置如何在需要时具有特定 ID 的原子被发现 (array 比 hash 快)
- *first value=group ID*: group ID 原子首先出现在内部原子列表中的组

LAMMPS 的输入参数说明

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
# ----- Create Atoms -----
lattice fcc 4
region box block 0 1 0 1 0 1 units lattice
create_box 1 box

lattice fcc 4 orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
create_atoms 1 box
replicate 1 1 1
```

- *lattice*: 设定晶格信息 (可选择的晶格类型有 sc, fcc, bcc, hcp, diamond 等)、
晶格常数 (数值 4)、晶格矢量方向等
- *region*: 设定模拟的原胞，此处设定模拟的名为 *box* 的 block(可以理解为原胞) 采
用晶格单位，并要求 *box* 每个方向的大小取为一个晶格常数
- *create_box*: 使用 *region* 确定的参数构建模拟的 *box*，数量为 1 个
- *replicate*: 设定每个方向上重复的元胞数目

LAMMPS 的输入参数说明

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化
状态方程
拉伸与压力下的形变
模拟
模拟晶界的形成
拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟
长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹
碳纳米管的拉伸
硅柱的拉伸裂纹
硅-碳纳米管复合材料
的拉伸
 $ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

```
# ----- Define Interatomic Potential -----
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * Al99.eam.alloy Al
neighbor 2.0 bin
neigh_modify delay 10 check yes
```

- *pair_style*: 设定原子间相互作用 (力场) 类型, 此处势函数的形式为 `eam/alloy`
- *pair_coeff * * Al99.eam.alloy Al*: 设定相互作用势 (力场) 的系数
势函数 (力场) 的扩展名提示的是使用相互作用的类型 (`eam.alloy = eam/alloy`)
- *neighbor*: 设置表面距离
- *neigh_modify*: 设置原子运动

LAMMPS 的输入参数说明

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化
状态方程
拉伸与压力下的形变
模拟
模拟晶界的形成
拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
裂的原子模拟
长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹
碳纳米管的拉伸
硅柱的拉伸裂纹
硅-碳纳米管复合材料
的拉伸
 $ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

```
# ----- Define Settings -----
compute eng all pe/atom
compute eatoms all reduce sum c_eng
```

- *compute*: 定义计算变量:

- 1 变量 *eng*: 定义为平均每个原子的势能，并且存储在 ID: *eng* 中
- 2 变量 *eatoms*: 定义为求和全部变量 *eng* 的值: *reduce* 表示减(负)，对 *eng* 求和并存储在 ID: *eatoms* 中

LAMMPS 的输入参数说明

```
# ----- Run Minimization -----
reset_timestep 0
fix 1 all box/relax iso 0.0 vmax 0.001
thermo 10
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
min_style cg
minimize 1e-25 1e-25 5000 10000
```

- *reset_timestep*: 重新设定时间模拟步数⁶ (此处归零: 0)
- *fix*: 设定 box/relax, 能量最小化过程中对模拟盒施外压, 各向同性 (iso) 都弛豫到 0.0 Pa: *vmax*: 正压压缩, 负压膨胀
- *thermo*: 每运行10次在屏幕上输出一次运行结果
- *thermo_style*: 设定屏幕输出信息
- *min_style*: 设定优化算法 (最小化算法), *cg* 指定共轭梯度法
- *minimize*: 设定开始最小化过程和最小化收敛精度和最大迭代次数:
其中 1,3 项为能量最小化, 2,4 项为能量梯度 (力)
(原胞弛豫的模拟由晶格常数为 4Å 到 4.05Å)

⁶ LAMMPS 模拟中, 一般需要设置能量最小化、弛豫、数据采集等阶段, 不同阶段模拟步数不同。默认情况下, 模拟步数是从模拟开始到模拟结束一直累加计算的

LAMMPS 的输入参数说明

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
variable natoms equal "count(all)"
variable teng equal "c_eatoms"
variable length equal "lx"
variable ecoh equal "v_teng/v_natoms"
```

- *natoms*: 变量定义所有原子数
- *teng*: 变量定义总的势能: *teng*=*eatoms*
- *length*: 变量定义模拟原胞长度: *length*=*lx*(模拟盒 *x* 方向为例)
- *ecoh*: 变量定义内聚能: *ecoh*=*v_teng*/*v_natoms*⁷

```
print "Total energy (eV) = ${teng};"
print "Number of atoms = ${natoms};"
print "Lattice constant (Angstroms) = ${length};"
print "Cohesive energy (eV) = ${ecoh};"
print "All done!"
```

- 设定屏幕输出和 log 文件的输出变量
- *{}\$*表示定义变量的引用

⁷同一语句中出现多个变量引用时用*v_variable* 表示

LAMMPS 的输出结果

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

LAMMPS 执行命令:

```
lmp -in calc_fcc.in
```

```
Total # of neighbors = 280
Ave neights/atom = 70
Neighbor list builds = 0
Dangerous builds = 0
Total energy (eV) = -13.4399999527351;
Number of atoms = 4;
Lattice constant (Angstroms) = 4.05000466178543;
Cohesive energy (eV) = -3.35999998818377;
All done!
Total wall time: 0:00:00
```

Fig.: The end of the logfile/screen output using LAMMPS.

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
# Find minimum energy fcc configuration
# Mark Tschopp, 2010
# This requires the variable latconst to be input via the command line
# e.g., lmp_wm_no-mpi -var latconst 4 < calc_fcc_ver1.in

# ----- Initialize Simulation -----
clear
units metal
dimension 3
boundary p p p
atom_style atomic
atom_modify map array

# ----- Create Atoms -----
lattice fcc ${latconst}
region box block 0 1 0 1 0 1 units lattice
create_box 1 box

lattice fcc ${latconst} orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
create_atoms 1 box
replicate 1 1 1

# ----- Define Interatomic Potential -----
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * Al99.eam.alloy Al
neighbor 2.0 bin
neigh_modify delay 10 check yes

# ----- Define Settings -----
compute eng all pe/atom
compute eatoms all reduce sum c_eng

# ----- Run Minimization -----
reset_timestep 0
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
fix 1 all box/relax iso 0.0 vmax 0.001
thermo 10
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
min_style cg
minimize 1e-25 1e-25 5000 10000

variable natoms equal "count(all)"
variable teng equal "c_eatoms"
variable length equal "lx"
variable ecoh equal "v_teng/v_natoms"

print "Total energy (eV) = ${teng};"
print "Number of atoms = ${natoms};"
print "Lattice constant (Angstroms) = ${length};"
print "Cohesive energy (eV) = ${ecoh};"
print "All done!"
```

LAMMPS 执行命令 (指定变量):

lmp -in calc_fcc.in -var latconst 4

LAMMPS 的输入文件: 基于 Matlab 的执行



LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
# Find minimum energy fcc configuration
# Mark Tschopp, 2010
# This requires the variable latconst to be input via the command line
# e.g., lmp_wm_no-mpi -var latconst 4 < calc_fcc_ver1.in

# ----- Initialize Simulation -----
clear
units metal
dimension 3
boundary p p p
atom_style atomic
atom_modify map array

# ----- Create Atoms -----
lattice fcc ${latconst}
region box block 0 1 0 1 0 1 units lattice
create_box 1 box

lattice fcc ${latconst} orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
create_atoms 1 box
replicate 1 1 1

# ----- Define Interatomic Potential -----
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * Al99.eam.alloy Al
neighbor 2.0 bin
neigh_modify delay 10 check yes

# ----- Run 0 -----
run 0

variable natoms equal "count(all)"
variable teng equal "pe"
variable length equal "lx"
```

LAMMPS 的输入文件: 基于 Matlab 的执行 (cont.)



LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力建模

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂

的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的

均方位移

```
variable ecoh equal "v_teng/v_natoms"  
  
print "Total energy (eV) = ${teng};"  
print "Number of atoms = ${natoms};"  
print "Lattice constant (Angstroms) = ${length};"  
print "Cohesive energy (eV) = ${ecoh};"  
print "%% ecoh = ${ecoh};"  
  
print "All done!"
```

LAMMPS 的输入文件: 基于 Matlab 的执行

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压缩下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
% MATLAB Script for running LAMMPS multiple times

count = 0;
for i = 3.0:0.10:5.0
    % command_line = ['lmp_win_no-mpi -var latconst ' num2str(i) ' < calc_fcc_ver2.in'];
    command_line = ['lmp -var latconst ' num2str(i) ' < calc_fcc_ver2.in'];

    % this next line executes the command line
    system(command_line)

    % all that is left is to mine the 'log.lammps' file for the energy
    fid = fopen('log.lammps');
        tline = fgetl(fid);
        while ~feof(fid)
            matches = strfind(tline, '%');
            num = length(matches);
            if num > 0 && matches == 1
                teval = strrep(tline,'%', '');
                eval(teval)
            end
            tline = fgetl(fid);
        end
    fclose(fid);

    % store the values in a matrix
    count = count + 1;
    X(count) = i; Y(count) = ecoh;
end

plot(X,Y,'-*r'), axis square
```

LAMMPS 的输入文件: 基于 Python 的执行



LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压缩下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
# how do I read each line in script, find the flag, and assign ecoh to a vector Y for plotting

import glob, os
import time

start_time = time.time()
target = "%%" "
y = []
for file in glob.glob("log_*.lammmps"):
    with open(file) as f:
        for line in f:
            if target in line and "print" not in line:
                #             exec(line.replace("%%", "").replace(";", ""))
                ecoh= line.replace("%%", "").replace(";", "").replace("\n", "")
                y.append(ecoh)
                #             y.append(float(ecoh))

print("--- %s seconds ---" % (time.time() - start_time))
```

LAMMPS 的输入文件: 基于 Python 的执行



LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压缩下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
import numpy as np
import subprocess
import shlex
import glob, os
import time

start_time = time.time()

j = 0
x = []
y = []
target = "%% "
for i in list(np.arange(3.00, 5.05, 0.10)):
    command_line = f'lmp_serial -in calc_fcc_ver2.in -var latconst {i:0.02f} -log log_{j:03d}.la
    x.append(round(i,3))
    file = f"log_{j:03d}.lammps"
    j += 1
    print(command_line)
    args = shlex.split(command_line)
    p = subprocess.Popen(args) # Success!
    p.wait()
    with open(file) as f:
        for line in f:
            if target in line and "print" not in line:
                exec(line.replace("%% ","").replace(";", ""))
                ecoh=line.replace("%% ","").replace(";", "").replace("\n","");
                y.append(float(ecoh))

print("--- %s seconds ---" % (time.time() - start_time))
# %matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt
```

LAMMPS 的输入文件: 基于 Python 的执行 (cont.)



LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的均方位移

```
from pylab import *
figure()
plot(x, y, 'r*-')
xlabel('Lattice constant (Angstrom)')
ylabel('Cohesive Energy (eV)')
title('aluminum cohesive energy evolution')
show()
```

状态方程

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

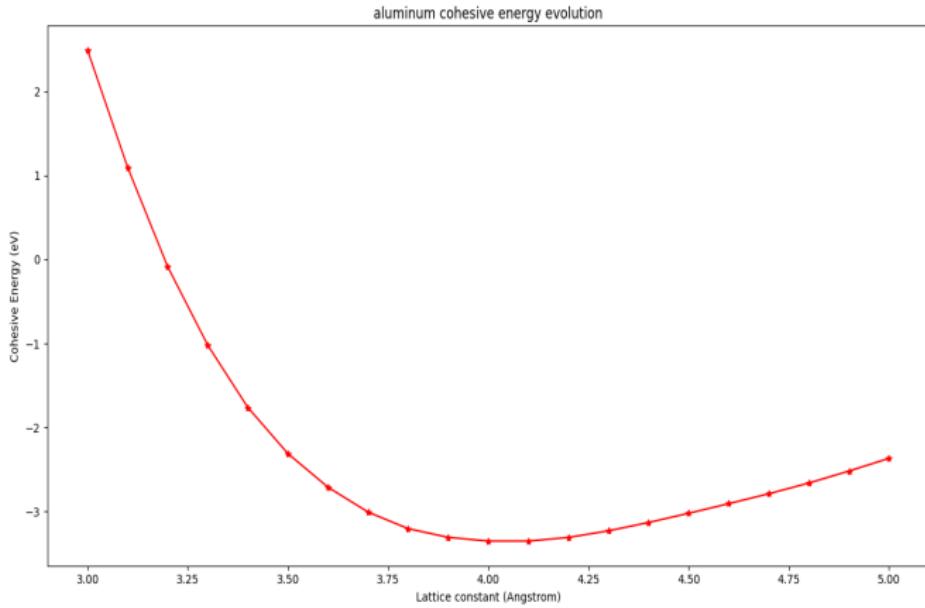


Fig.: Aluminum cohesive energy evolution.

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# LAMMPS INPUT SCRIPT
# Input file for uniaxial tensile loading of single crystal aluminum
# Mark Tschopp
# To execute, use the syntax "lmp_exe < in.tensile.txt" from command prompt
#####
# VARIABLES
variable n_iter equal 20000

#####
# INITIALIZATION
units metal
dimension 3
boundary p p p
atom_style atomic
variable latparam equal 4.05

#####
# ATOM DEFINITION
lattice fcc ${latparam} orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
region whole block 0 10 0 10 0 10
create_box 1 whole
create_atoms 1 region whole

#####
# DEFINE INTERATOMIC POTENTIAL
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * Al99.eam.alloy Al

#####
# DEFINE COMPUTES
compute csym all centro/atom fcc
compute peratom all pe/atom
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# EQUILIBRATION
reset_timestep 0
timestep 0.001
velocity all create 300 12345 mom yes rot no
fix 1 all npt temp 300 300 1 iso 0 0 1 drag 1

# Set thermo output
thermo 1000
thermo_style custom step lx ly lz press pxx pyy pzz pe temp

# Run for at least 10 picosecond (assuming 1 fs timestep)
run ${n_iter}
unfix 1

# Store final cell length for strain calculations
variable tmp equal "lx"
variable L0 equal ${tmp}
print "Initial Length, L0: ${L0}"

#####
# DEFORMATION
reset_timestep 0

fix 1 all npt temp 300 300 1 y 0 0 1 z 0 0 1 drag 1
variable srate equal 1.0e10
variable sratel equal "v_srate / 1.0e12"
fix 2 all deform 1 x erate ${sratel} units box remap x

# Output strain and stress info to file
# for units metal, pressure is in [bars] = 100 [kPa] = 1/10000 [GPa]
# p2, p3, p4 are in GPa
variable strain equal "(lx - v_L0)/v_L0"
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的均方位移

```
variable p1 equal "v_strain"
variable p2 equal "-pxx/10000"
variable p3 equal "-pyy/10000"
variable p4 equal "-pzz/10000"
fix def1 all print 100 "${p1} ${p2} ${p3} ${p4}" file Al_tens_100.def1.txt screen no

# Use cfg for AtomEye
dump 1 all cfg 250 dump.tens_*.cfg mass type xs ys zs c_csym c_peratom fx fy fz
dump_modify 1 element Al

# Display thermo
thermo 1000
thermo_style custom step v_strain temp v_p2 v_p3 v_p4 ke pe press
run ${n_iter}

#####
# SIMULATION DONE
print "All done"
```

LAMMPS 的输入文件: 基于 Matlab 的执行



LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
%% Analyze def1.txt files
% Plot the various responses

d = dir('*.def1.txt');
for i = 1:length(d)
    % Get data
    fname = d(i).name;
    A = importdata(fname);
    strain = A.data(:,1);
    stress = A.data(:,2:4);

    % Generate plot
    plot(strain,stress(:,1),'-or','LineWidth',2,'MarkerEdgeColor','r',...
        'MarkerFaceColor','r','MarkerSize',5),hold on
    plot(strain,stress(:,2),'-ob','LineWidth',2,'MarkerEdgeColor','b',...
        'MarkerFaceColor','b','MarkerSize',5),hold on
    plot(strain,stress(:,3),'-og','LineWidth',2,'MarkerEdgeColor','g',...
        'MarkerFaceColor','g','MarkerSize',5),hold on
    axis square
    ylim([0 10])
    set(gca,'LineWidth',2,'FontSize',24,'FontWeight','normal','FontName','Times')
    set(get(gca,'XLabel'),'String','Strain','FontSize',32,'FontWeight','bold','FontName','Times')
    set(get(gca,'YLabel'),'String','Stress (GPa)','FontSize',32,'FontWeight','bold','FontName','Times')
    set(gcf,'Position',[1 1 round(1000) round(1000)])]

    % Export figure to tif file
    exportfig(gcf,strrep(fname,'.def1.txt','.tif'),'Format','tiff','Color','rgb','Resolution',300)
    close(1)
end
```

LAMMPS 的输入文件: 基于 Python 的执行



LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import csv

results = []
with open('Al_tens_100.def1.txt',newline='') as file:
    reader = csv.reader(file, delimiter=' ')
    next(reader) # Skip header row.
    for row in reader:
        row2 = [float(i) for i in row]
        results.append(row2)
        print(row2)

results2 = np.transpose(results)
plt.plot(results2[0],results2[1], '-or', label='Stress in X', lw=2, markersize = 5, mec = 'r', mfc = 'r')
plt.plot(results2[0],results2[2], '-ob', label='Stress in Y', lw=2, markersize = 5, mec = 'b', mfc = 'b')
plt.plot(results2[0],results2[3], '-og', label='Stress in Z', lw=2, markersize = 5, mec = 'g', mfc = 'g')
plt.xlabel('Strain', fontsize=16)
plt.ylabel('Stress (GPa)', fontsize=16)
plt.title('Stress versus Strain', fontsize=16)
plt.legend(fontsize=12)
# plt.axis(aspect='equal')
plt.ylim(0,10)
plt.show()
```

应力-应变曲线

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

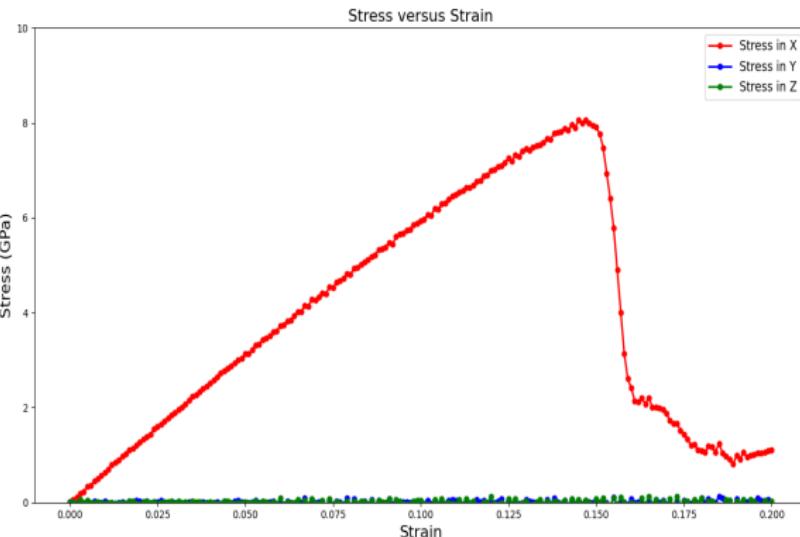


Fig.: Stress-strain curve for uniaxial tensile loading of single crystal aluminum in the $<100>$ loading direction.

拉伸载荷

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

Fig.: Tensile Loading of an Aluminum Single Crystal.. ▶ ⏪ ⏩ ⏴ ⏵ ⏵ ⏵

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# LAMMPS INPUT SCRIPT
# Input file for uniaxial compressive loading of single crystal aluminum
# Mark Tschopp
# Syntax "lmp_exe < in.comp.txt" from command prompt

#####
# INITIALIZATION
units metal
dimension 3
boundary p p p
atom_style atomic
variable latparam equal 4.05

#####
# ATOM DEFINITION
lattice fcc ${latparam} orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
region whole block 0 10 0 10 0 10
create_box 1 whole
create_atoms 1 region whole

#####
# DEFINE INTERATOMIC POTENTIAL
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * Al99.eam.alloy Al

#####
# DEFINE COMPUTES
compute csym all centro/atom fcc
compute peratom all pe/atom

#####
# EQUILIBRATION
reset_timestep 0
timestep 0.001
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟
纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
velocity all create 300 12345 mom yes rot no
fix 1 all npt temp 300 300 1 iso 0 0 1 drag 1

# Set thermo output
thermo 1000
thermo_style custom step lx ly lz press pxx pyy pzz pe temp

# Run for at least 10 picosecond (assuming 1 fs timestep)
run 20000
unfix 1

# Store final cell length for strain calculations
variable tmp equal "lx"
variable L0 equal ${tmp}
print "Initial Length, L0: ${L0}"

#####
# DEFORMATION
reset_timestep 0

fix 1 all npt temp 300 300 1 y 0 0 1 z 0 0 1 drag 1
variable srate equal 1.0e10
variable srate1 equal "-v_srate / 1.0e12"
fix 2 all deform 1 x erate ${srate1} units box remap x

# Output strain and stress info to file
# for units metal, pressure is in [bars] = 100 [kPa] = 1/10000 [GPa]
# p2, p3, p4 are in GPa
variable strain equal "(lx - v_L0)/v_L0"
variable p1 equal "v_stress"
variable p2 equal "-pxx/10000"
variable p3 equal "-pyy/10000"
variable p4 equal "-pzz/10000"
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断裂

断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
fix def1 all print 100 "${p1} ${p2} ${p3} ${p4}" file Al_comp_100.def1.txt screen no
# Use cfg for AtomEye
dump 1 all cfg 250 dump.comp_*.cfg mass type xs ys zs c_csym c_peratom fx fy fz
dump_modify      1 element Al

# Display thermo
thermo 1000
thermo_style custom step v_strain temp v_p2 v_p3 v_p4 ke pe press
run 20000

#####
# SIMULATION DONE
print "All done"
```

应力-应变曲线

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

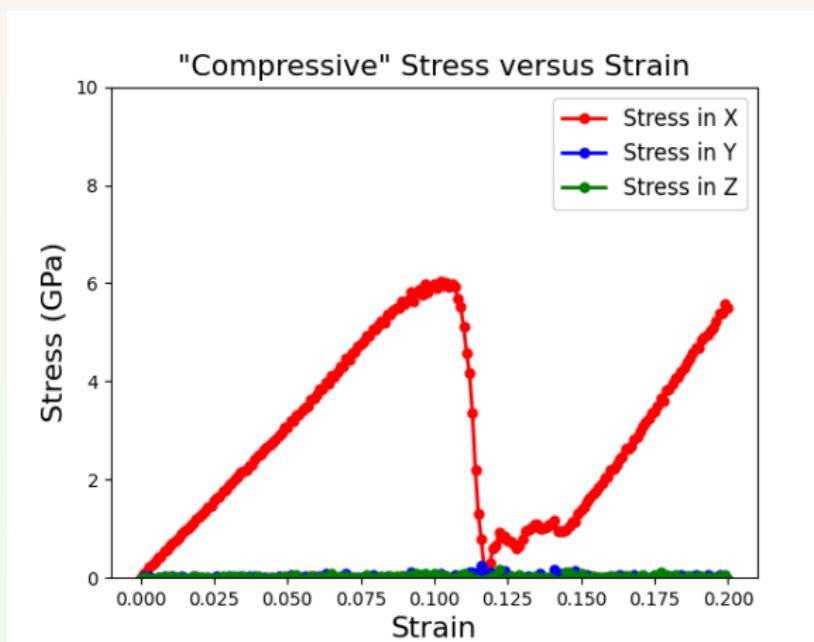


Fig.: Compressive Stress-strain curve for uniaxial compression loading of single crystal aluminum in the $\langle 100 \rangle$ loading direction.

压缩载荷

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

Fig.: Compression Loading of an Aluminum Single Crystal.

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压缩下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
# LAMMPS Input File for Grain Boundaries
# Mark Tschopp
# This file will generate a single Sigma5(310) STGB
# Syntax "lmp_exe < in.al_sig5_310_stgb.txt" from command prompt

# ----- Initialize Simulation -----
clear
units metal
dimension 3
boundary p p p
atom_style atomic

# ----- Create Atomistic Structure -----
lattice fcc 4.05
region whole block 0.000000 12.807225 -64.0361225 64.0361225 0.000000 4.050000 units box
create_box 2 whole
region upper block INF INF 0.000000 64.0361225 INF INF units box
lattice fcc 4.05 orient x 0 3 1 orient y 0 -1 3 orient z 1 0 0
create_atoms 1 region upper
region lower block INF INF -64.0361225 0.000000 INF INF units box
lattice fcc 4.05 orient x 0 3 -1 orient y 0 1 3 orient z 1 0 0
create_atoms 2 region lower
group upper type 1
group lower type 2

# ----- Define Interatomic Potential -----
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * Al99.eam.alloy Al Al
neighbor 2.0 bin
neigh_modify delay 10 check yes

# ----- Displace atoms and delete overlapping atoms -----
displace_atoms upper move 0 0 0 units lattice
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
delete_atoms overlap 0.35 lower upper

# ----- Define Settings -----
compute csym all centro/atom fcc
compute eng all pe/atom
compute eatoms all reduce sum c_eng

# ----- Run Minimization -----
reset_timestep 0
thermo 10
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
dump 1 all cfg 25 dump.sig5_minimization_*.cfg mass type xs ys zs c_csym c_eng fx fy fz
dump_modify 1 element Al Al
min_style cg
minimize 1e-15 1e-15 5000 5000
undump 1

# ----- Run Minimization 2-----
# Now allow the box to expand/contract perpendicular to the grain boundary
reset_timestep 0
thermo 10
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
fix 1 all box/relax y 0 vmax 0.001
min_style cg
minimize 1e-15 1e-15 5000 5000

# ----- Calculate GB Energy -----
variable minimumenergy equal -3.360000
variable esum equal "v_minimumenergy * count(all)"
variable xseng equal "c_eatoms - (v_minimumenergy * count(all))"
variable gbarea equal "lx * lz * 2"
variable gbe equal "(c_eatoms - (v_minimumenergy * count(all)))/v_gbarea"
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

```
variable gbeamJm2 equal ${gbe}*16021.7733
variable gbernd equal round(${gbeamJm2})
print "GB energy is ${gbeamJm2} mJ/m^2"

# ----- Dump data into Data file -----
reset_timestep 0
dump 1 all cfg 10000 dump.al_sig5_310_*.cfg mass type xs ys zs c_csym c_eng fx fy fz
dump_modify 1 element Al Al
minimize 1e-15 1e-15 5000 5000
undump 1

write_restart restart.al_sig5_310_stgb
print "All done"
```

LAMMPS 的输出文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

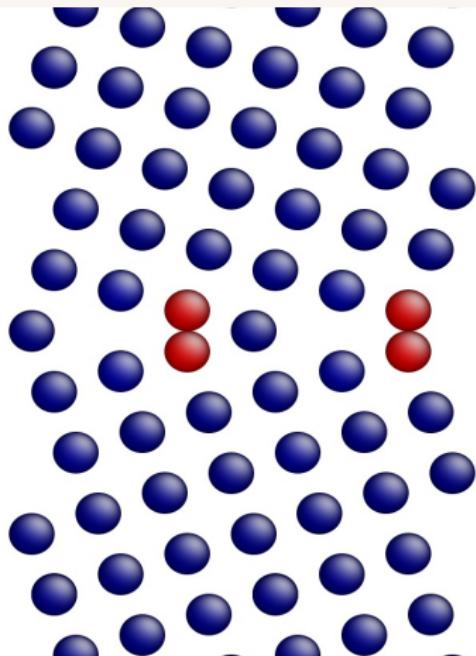


Fig.: The grain boundary structure prior to minimization.

LAMMPS 的输出文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

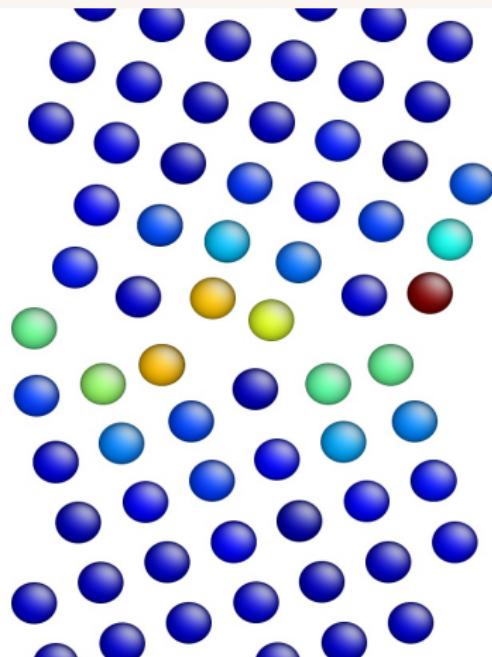


Fig.: The grain boundary structure after minimization (overlap distance equals 0.35).

LAMMPS 的输出文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

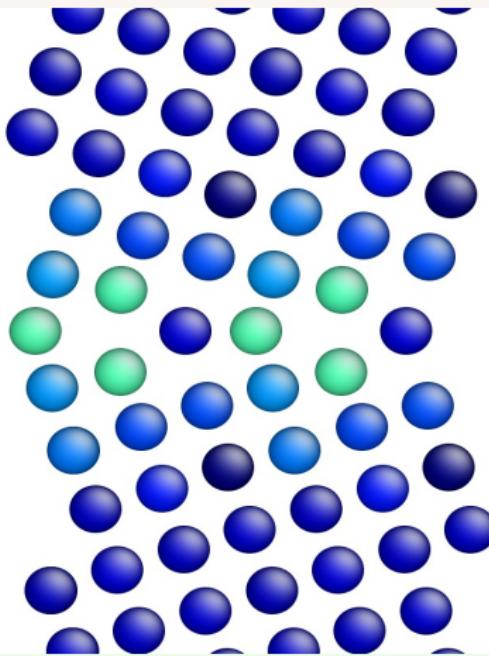


Fig.: The grain boundary structure after minimization (overlap distance equals 1.50).

LAMMPS 的输出文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

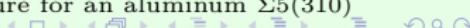
碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

Fig.: The minimization of the grain boundary structure for an aluminum $\Sigma 5(310)$ symmetric tilt grain boundary.



LAMMPS 的输出文件

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

Fig.: The minimization of the grain boundary structure for an aluminum $\Sigma 5(310)$ symmetric tilt grain boundary (with a slightly different starting position.)

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# Interfacial Fracture
# Mark Tschopp, Nathan Rhodes
# syntax: lmp_exe -var datfile Fe_110_sig3 -var nloop 150 < in.gb_fracture.txt
# Simulation deletes atoms outside of +/- deldist from GB and constrains and pulls
# atoms outside of +/- fixdist from GB to fracture the GB
#####

# I first declare and test these in the script; later I pass them through command line
# variable datfile index Fe_110_sig3
# variable nloop equal 150

variable strain equal 0.001
variable repx equal 1
variable repz equal 1
variable strain2 equal "1+v_strain"
variable deldist equal 50
variable fixdist equal 45

#####
# INITIALIZATION
units metal
dimension 3
boundary p p p
atom_style atomic
atom_modify map array

#####
# SIMULATION CELL VARIABLES (in Angstroms)

read_data ${datfile}.txt

#variable minlength equal 100
variable xlen equal lx
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
variable ylen equal ly
variable zlen equal lz

print "lx: ${xlen}"
print "ly: ${ylen}"
print "lz: ${zlen}"

# Replicate simulation cell in each direction
replicate ${repX} 1 ${repZ}

#####
# INTERATOMIC POTENTIAL
pair_style eam/fs
pair_coeff * * Fe-C_Hepburn_Ackland.eam.fs Fe C

# Compute stress information for Atomeye visualization
compute stress all stress/atom NULL
compute stress1 all reduce sum c_stress[1]
compute stress2 all reduce sum c_stress[2]
compute stress3 all reduce sum c_stress[3]
compute stress4 all reduce sum c_stress[4]
compute stress5 all reduce sum c_stress[5]
compute stress6 all reduce sum c_stress[6]

# Compute distance for each side of the grain boundary to displace
#variable ly1 equal ly
compute lyllow all reduce min y
compute lyhi all reduce max y

#####
# Minimize first
reset_timestep 0
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
thermo 10
thermo_style custom step lx ly lz press pxx pyy pzz pe c_ly1low c_ly1hi
min_style cg
fix 1 all box/relax x 0.0 z 0.0 couple none vmax 0.001
minimize 1.0e-15 1.0e-15 100 1000
unfix 1

#####
# CREATE REGIONS FOR BOUNDARY CONDITIONS

# lx, ly, lz are fixed for the rest
thermo_style custom step press pxx pyy pzz pe c_ly1low c_ly1hi

# Delete groups of atoms far from boundary
region rlow block 0 200 -200 -${deldist} 0 200 units box
region rhigh block 0 200 ${deldist} 200 0 200 units box
group glow region rlow
group ghigh region rhight
group ghigh region rhight

delete_atoms group glow
delete_atoms group ghigh

# Create groups to fix and displace
region rgblow block 0 200 -200 -${fixdist} 0 200 units box
region rgbhigh block 0 200 ${fixdist} 200 0 200 units box
group ghigh region rgbhigh
group gblow region rgblow

# Put fixed boundary condition on edge atoms by setting forces to zero
fix 2 ghigh setforce 0 0 0
fix 3 gblow setforce 0 0 0
#####
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的均方位移

```
run 0
variable ly1 equal "c_ly1hi - c_ly1low"
variable ly0 equal ${ly1}
variable lydelta equal "v_strain*v_ly0/2"
print "Length of box w/ GB: ${ly0}"
print "y Strain increments: ${lydelta}"

# Setup file output (time in ps, pressure in GPa)
variable p1 equal "(v_ly1-v_ly0)/v_ly0"
variable p2 equal "-pxx/10000"
variable p3 equal "-pyy/10000"
variable p4 equal "-pzz/10000"
variable p5 equal "-pxy/10000"
variable p6 equal "-pxz/10000"
variable p7 equal "-pyz/10000"
variable p8 equal "pe"

# Output stress and strain information to datafile for Matlab post-processing
fix gb_fracture all print 1 "${p1} ${p2} ${p3} ${p4} ${p5} ${p6} ${p7} ${p8}" file data.${datfile}_fracture.txt screen no
run 0

#####
# MS Deformation loop
variable a loop ${nloop}
label loop
# Displace the atoms and minimize again
# displacement_atoms group-ID style args keyword value
displacement_atoms gblow move 0 -${{lydelta}} 0 units box
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的均方位移

```
displace_atoms gbhigh move 0 ${lydelta} 0 units box
minimize 1.0e-15 1.0e-15 100 1000
# Create cfg files with stress in y direction for AtomEye viewing
reset_timestep ${a}
dump 1 all cfg 1000 dump.${datfile}_*.cfg mass type xs ys zs c_stress[2]
dump_modify 1 element Fe C
dump_modify 1 first yes
dump_modify 1 pad 3
run 0
undump 1
next a
jump in.gb_fracture.txt loop
unfix gb_fracture
#####
# SIMULATION DONE
print "All done"
```

LAMMPS 的输出文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力建模

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂

的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的

均方位移

Fig.: The fracture of a Fe symmetric tilt grain boundary. Atoms are colored by the stress in the y-direction.



LAMMPS 的输入文件

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
# LAMMPS Input File for Grain Boundaries
# Mark Tschopp
# This file will generate numerous input files for LAMMPS
# using a large number of grain boundaries
# syntax: lmp_exe -in in.gb_metrics.txt
# or draw in variables from command line, e.g.,
# syntax: lmp_exe -var fname gb_metrics -var datfile Fe_110_sig3 -in in.gb_metrics.txt

# ----- Setup Variables -----
variable etol equal 1.0e-10
variable ftol equal 1.0e-10
variable maxiter equal 5000
variable maxeval equal 10000
variable cutoff equal 3.5
variable datfile string "Fe_110_sig3"
variable fname string "gb_metrics"
variable potname string "potential_FeC.txt"

log log.${fname}.txt

#####
# INITIALIZATION
units metal
dimension 3
boundary p p p
atom_style atomic
atom_modify map array

#####
# SIMULATION CELL VARIABLES (in Angstroms)

# DATA FILE
read_data ${datfile}.txt
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
# DUMP FILE:  
# region box1 prism 0 1 0 1 0 1 0 0 0  
# create_box 5 box1  
# read_dump ${fname} 0 x y z add yes  
  
replicate 1 1 1  
  
# ----- Define Interatomic Potential -----  
include ${potname}  
  
# ----- Define Computes -----  
compute 1 all pe/atom  
compute 2 all property/atom fx fy fz  
# or bcc/14 for snn  
# or fcc/18 for snn  
compute 3 all centro/atom bcc  
compute 3a all centro/atom 14  
#compute 3b all centro/atom fcc  
#compute 3c all centro/atom 18  
compute 4 all cna/atom ${cutoff}  
compute 5 all coord/atom cutoff ${cutoff}  
compute 6 all stress/atom NULL  
# compute 7 all voronoi/atom  
  
# UNUSED per-atom computes (but could be used)  
#compute 8 all ackland/atom  
#compute 9 all cnp/atom 3.5  
  
# 0.8535 * latconst (fcc), 1.207 * latconst (bcc), hcp... much more complicated. 0.25 is sigma  
#compute 10 all entropy/atom 0.25 3.5  
  
# entropy for fcc Al (4.05 to 5.7) above. 3 components of unit vector
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#compute 11 all basal/atom

# functions.  require more outputs - 5 of them?
#compute 12 all orientorder/atom degrees 5 4 6 8 10 12 nnn 8 cutoff 3.5

# Not built with Windows executable (doh! oh snap...):
# compute 13 all ptm/atom fcc-hcp-bcc-ico 0.15 all
# compute 14 all snap/atom 1.4 0.95 6 2.0 1.0

dump 1 all custom 10000 dump.${fname}.* id c_1 c_2[1] c_3 c_3a c_4 c_5 &
      c_6[1] # c_7[1] &
      # c_3b c_3c c_8 c_9 c_10 c_11 c_12

# ----- Run Minimization -----
reset_timestep 0
thermo 10
thermo_style custom step pe press
min_style cg
minimize ${etol} ${ftol} ${maxiter} ${maxeval}

# ----- MATLAB Interface Data -----
variable natoms equal "count(all)"
variable perx equal lx
variable pery equal ly
variable perz equal lz

label loopi
variable i loop ${natoms}
variable xd equal x[$i]
variable yd equal y[$i]
variable zd equal z[$i]
variable pi equal c_1[$i]
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
variable p2 equal c_2[$i][1]
variable p3 equal c_2[$i][2]
variable p4 equal c_2[$i][3]
variable p5 equal c_3[$i]
variable p6 equal c_3a[$i]
variable p7 equal c_4[$i]
variable p8 equal c_5[$i]
variable p9 equal c_6[$i][1]
variable p10 equal c_6[$i][2]
variable p11 equal c_6[$i][3]
variable p12 equal c_6[$i][4]
variable p13 equal c_6[$i][5]
variable p14 equal c_6[$i][6]
# variable p15 equal c_7[$i][1]
# variable p16 equal c_7[$i][2]

# FOR MATLAB
# This is just an example of how you could draw each individual value into a separate array
# ...or just modify the below (Python) print to bring into a large array in MATLAB
# Beware the triple quotes! Even if you comment them out, they persist...
#print """
#%{xd($i) = ${xd}; yd($i) = ${yd}; zd($i) = ${zd};
#%{p_pe($i) = ${p1}; p_f($i,1) = ${p2}; p_f($i,2) = ${p3}; p_f($i,3) = ${p4};
#%{p_centro_fnn($i) = ${p5}; p_centro_snn($i) = ${p6}; p_cna($i) = ${p7}; p_coord($i) = ${p8};
#%{p_stress($i,1) = ${p9}; p_stress($i,2) = ${p10}; p_stress($i,3) = ${p11};
#%{p_stress($i,4) = ${p12}; p_stress($i,5) = ${p13}; p_stress($i,6) = ${p14};
#%{p_voronoi($i,1) = ${p15}; p_voronoi($i,2) = ${p16};
#"""

# FOR PYTHON
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
# Define a list, i.e., data = []
# run through each line, flagging the %% (ignores the ones with "print" in them)
# exec(line.replace("%%","data.append(")+")")      (print)
# ... OR FOR MATLAB
# just draw this straight into an array
# exec([replace(line,"%","data=[data,"),"]])    (print)
print "%[$i,${xd},${yd},${zd},${p1},${p2},${p3},${p4},${p5},${p6},${p7},${p8},${p9},$${p10}, ${p11}, ${p12}, ${p13}, ${p14}]" # ,${p15}, ${p16}]"

next i
jump in.${fname}.txt loop
variable i delete

# FOR MATLAB uncomment
# print "%natoms = ${natoms};perx = ${perx};pery = ${pery};perz = ${perz};"

# FOR PYTHON uncomment
print "%natoms,perx,pery,perz = ${natoms},${perx},${pery},${perz}"

shell rm dump.${fname}.0

#####
# SIMULATION DONE
print "All done"
```

LAMMPS 的 data 文件

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
# Minimum Energy <110>(111) Symmetric Tilt GB Structure for LAMMPS
```

```
600 atoms
```

```
2 atom types
```

```
0.000000 6.994060 xlo xhi  
-123.994003 123.994003 ylo yhi  
0.000000 4.038020 zlo zhi
```

Atoms

```
1 1 5.479150 -110.221001 2.019010
```

```
2 1 5.478960 -115.167999 2.019010
```

```
3 1 4.313340 -113.516998 4.038020
```

```
4 1 5.479050 -112.694000 2.019010
```

```
.....
```

```
596 1 1.981210 119.306999 4.038020
```

```
597 1 1.981310 121.836998 4.038020
```

```
598 1 3.146950 120.946999 2.019010
```

```
599 1 3.147160 123.581001 2.019010
```

```
600 1 4.312650 122.422997 4.038020
```

LAMMPS 的输出文件

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的

均方位移

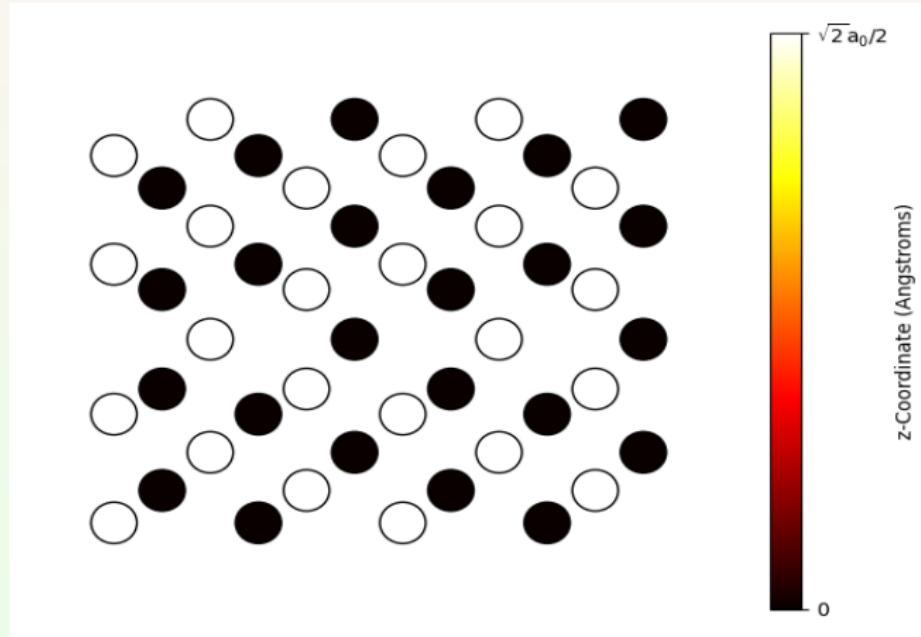


Fig.: The atoms colored by the in-plane coordinate (z-direction: the black and white grain boundary structure look for atoms that sit on different $\{110\}$ planes).

LAMMPS 的 data 文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

Model for PE

```
100      atoms
99      bonds
98      angles
97      dihedrals
```

```
1       atom types
1       bond types
1       angle types
1       dihedral types
```

```
0.0000  158.5000 xlo xhi
0.0000  158.5000 ylo yhi
0.0000  100.0000 zlo zhi
```

Masses

```
1       14.02
```

Atoms

1	1	1	5.6240	5.3279	51.6059	
2	1	1	7.4995	7.4810	50.2541	
3	1	1	8.2322	8.0236	51.2149	
4	1	1	9.6108	9.9075	51.7682	

.....

97	1	1	149.4077	149.1080	50.9198	
98	1	1	150.9509	151.0511	51.6108	
99	1	1	152.7009	152.8722	50.1044	
100	1	1	153.7197	153.9596	51.9171	

Bonds

```
1       1       1       2
```

LAMMPS 的 data 文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

2	1	2	3
3	1	3	4
4	1	4	5

96	1	96	97
97	1	97	98
98	1	98	99
99	1	99	100

Angles

1	1	1	2	3
2	1	2	3	4
3	1	3	4	5
4	1	4	5	6

7	1	7	8	9
---	---	---	---	---

95	1	95	96	97
96	1	96	97	98
97	1	97	98	99
98	1	98	99	100

Dihedrals

1	1	1	2	3	4
2	1	2	3	4	5
3	1	3	4	5	6
4	1	4	5	6	7

94	1	94	95	96	97
95	1	95	96	97	98
96	1	96	97	98	99
97	1	97	98	99	100

LAMMPS 中的键角与二面角

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的

均方位移

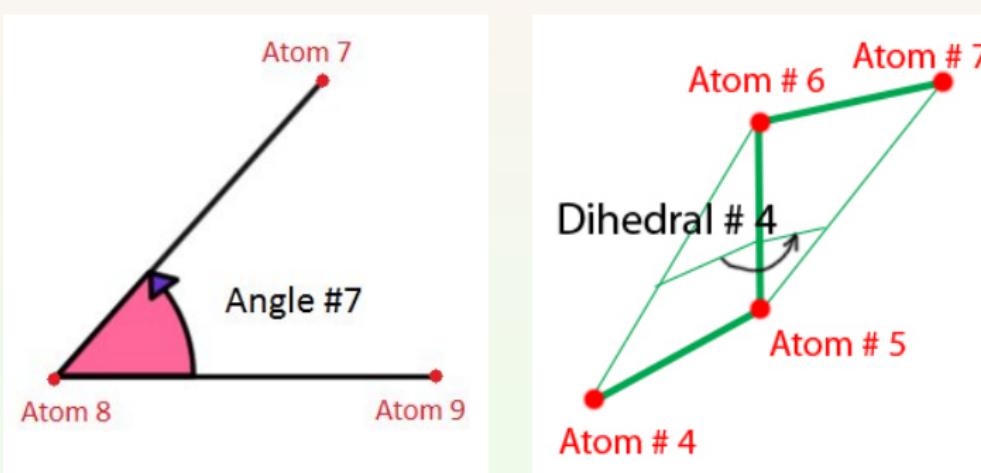


Fig.: A schematic of angles (left) and dihedral angles (right) between atoms defined in LAMMPS.

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
#####
# LAMMPS INPUT SCRIPT
# Polymer Chain Tutorial
# Mark Tschopp
# The methodology outlined here follows that from Hossain, Tschopp, et al. 2010, Polymer.
# The following script requires a LAMMPS data file containing the coordinates and
# appropriate bond/angle/dihedral lists for each united atom.
# syntax: lmp_exe -in in.deform_polymer_chain.txt

#####
# VARIABLES
variable fname index PE_cl100.txt
variable simname index PE_cl100

#####
# INITIALIZATION
units real
boundary f f f
atom_style molecular
log log.${simname}.txt
read_data ${fname}

#####
# DEFINE INTERATOMIC POTENTIAL
# Dreiding potential
neighbor 0.4 bin
neigh_modify every 10 one 10000
bond_style harmonic
bond_coeff 1 350 1.53
angle_style harmonic
angle_coeff 1 60 109.5
dihedral_style multi/harmonic
dihedral_coeff 1 1.73 -4.49 0.776 6.99 0.0
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸皱纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
pair_style lj/cut 10.5
pair_coeff 1 1 0.112 4.01 10.5

#####
# DEFINE COMPUTES
compute csym all centro/atom fcc
compute peratom all pe/atom
compute eng all pe/atom
compute eatoms all reduce sum c_eng

#####
# EQUILIBRATION
# Langevin dynamics at 500 K
velocity all create 500.0 1231
fix 1 all nve/limit 0.05
fix 2 all langevin 500.0 500.0 10.0 904297
thermo_style custom step temp
thermo 100
timestep 1
run 10000
unfix 1
unfix 2
write_restart restart.${simname}.dreiding1

#####
# MINIMIZATION

dump 1 all cfg 6 dump.PE_cl100_*.cfg mass type xs ys zs c_csym c_peratom fx fy fz
reset_timestep 0
fix 1 all nvt temp 500.0 500.0 100.0
thermo 20
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
min_style cg
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

```
minimize 1e-15 1e-15 1000 1000
#####
print "All done"
```

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

LAMMPS 的输出文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的

均方位移

Fig.: Equilibration process followed by minimization for a single polymer chain.

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
#####
# Deformation of Au nanowire #
# Structure generation #
units metal
atom_style atomic
boundary m m p

# define lattice with lattice parameter, origin, orientation in z, x, and y axis
latticei fcc 4.07 origin 0 0 0 orient z 1 1 0 orient x 0 0 -1 orient y -1 1 0
region box block 0 10 0 5 0 40 units lattice side in
create_box 1 box
create_atoms 1 box
region 1 prism 5.1 10.0 0 5 -1 1000 10 0 0
region 2 prism -1.0 4.9 0 5 -1 1000 -10 0 0
region 3 prism 14.9 20.0 0 5 -1 1000 -10 0 0
region 4 prism -20.0 -4.5 0 5 -1 1000 10 0 0
group del1 region 1
group del2 region 2
group del3 region 3
group del4 region 4
delete_atoms group del1 # trimming corner to make a rhombic wire
delete_atoms group del2 # trimming corner to make a rhombic wire
delete_atoms group del3 # trimming corner to make a rhombic wire
delete_atoms group del4 # trimming corner to make a rhombic wire
# Interatomic potential #
pair_style eam
pair_coeff # Au_u3.eam
neighbor 1.5 bin
neigh_modify every 1 delay 1
# Thermal equilibration at 300 K #
velocity all create 300 87654321 dist gaussian
velocity all zero linear
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
velocity all zero angular
thermo 200
thermo_style custom step atoms temp pe lx ly lz pzz press
thermo_modify lost warn norm yes flush yes
timestep 0.005 # ps (pico-second)
dump 1 all custom 20000 pos.dump id type x y z
fix 1 all npt 300.0 300.0 10.0 aniso NULL NULL NULL 0.0 0.0 10.0 drag 1.0
run 20000
# Tensile loading #
unfix 1
undump 1
reset_timestep 0
compute MyTemp all temp
compute MyPe all pe
compute peratom all stress/atom
# taking averages of T and potential energy between step 100 ~ 200
fix ThermoAve all ave/time 1 100 200 c_MyTemp c_MyPe
thermo 200
# saving a log.lammps file with timestep, atoms, T, potential energy, zbox, #
# volume, P in z-axis #
thermo_style custom step atoms f_ThermoAve[1] f_ThermoAve[2] lz vol pzz
thermo_modify lost warn norm yes flush yes
fix 1 all nvt 300.0 300.0 10.0
fix 2 all deform 200 z erate 0.0001 # equal to strain rate of 0.0001/ps
# dump 2 all cfg 20000 pos.*.cfg id type xs ys zs # for display with Atomeye
dump 2 all xyz 50000 Au_*.xyz # for display with MDL
# dump_modify 2 element Au # for display with Atomeye
run 500000
#####
#####
```

金纳米线的断裂模拟

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的

均方位移

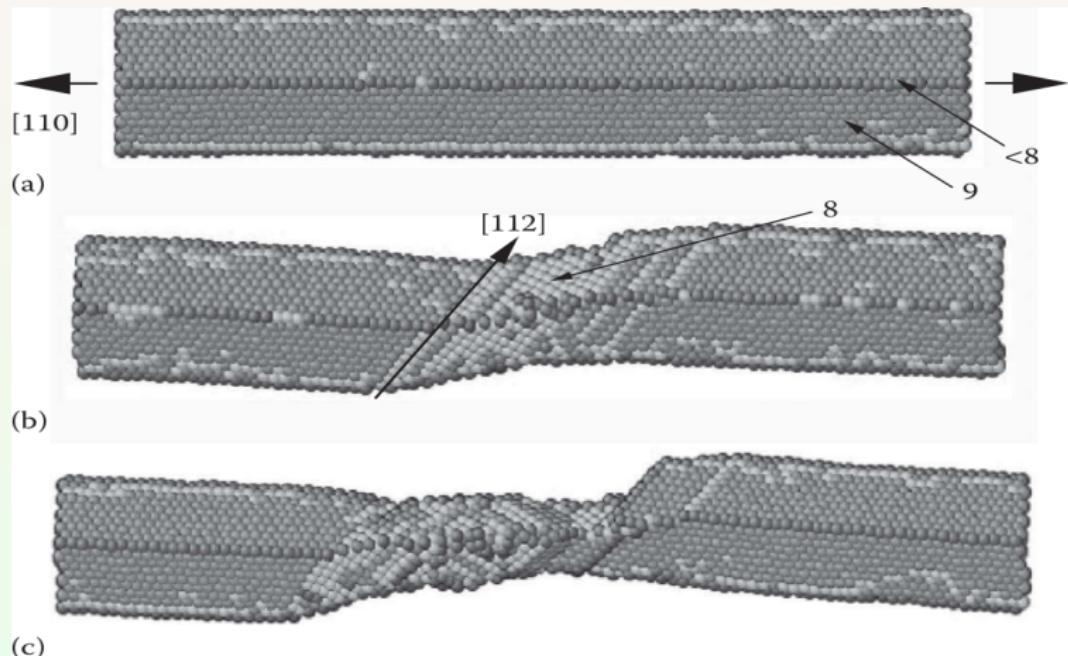


Fig.: Deformation behavior of an Au nanowire during tensile loading. Timestep=0 (a), 150,000 (b), 282,000 (c).

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# Nanodroplet of water on the graphene nanoribbon #
units metal
boundary p p p
atom_style full
bond_style harmonic
angle_style harmonic

# Loading position and angle, bond information #
read_data data.C-H2O

# Interatomic potential for hybrid-type #
angle_coeff 1 2.6018473 104.520000
bond_coeff 1 10.84 0.957200
pair_style hybrid airebo 2.5 0 1 lj/cut/coul/long/tip4p 2 3 1 1
0.125 9 8
pair_coeff 1 2 lj/cut/coul/long/tip4p 0.0032399 3.19
pair_coeff 2 2 lj/cut/coul/long/tip4p 0.0070575 3.16435
pair_coeff 2 3 lj/cut/coul/long/tip4p 0.0 0.0
pair_coeff 3 3 lj/cut/coul/long/tip4p 0.0 0.0
pair_coeff 1 3 lj/cut/coul/long/tip4p 0.0 0.0
pair_coeff * * airebo CH.airebo C NULL NULL
kspace_style pppm/tip4p 1.0e-4

# Wedging part #
region r_fix block INF 22.4 INF INF 9.0 11.0 units box

# Grouping #
group g_C type 1
group g_O type 2
group g_H type 3
group g_W union g_O g_H
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
group  g_fix region r_fix
group  g_MD subtract all g_fix

# Structure relaxation using energy minimization #
minimize 1e-5 1e-6 10000 100000
reset_timestep 0
compute  mype all pe/atom
compute  E_C g_C reduce sum c_mype
compute  E_W g_W reduce sum c_mype
thermo 100
thermo_style custom step temp pe c_E_C c_E_W
# Saving a log.lammps file with timestep, T, potential energy for Carbon #
# and water #
velocity g_MD create 300 790316 dist gaussian
timestep 0.002 # 2 femto-second (10^{-15} second)

fix 1 all nve
fix 2 g_fix setforce 0 0 0
fix 3 g_MD temp/rescale 10 300.0 300.0 5.0 0.8

dump mydump all cfg 5000 dump_*.cfg id type xs ys zs c_mype
dump_modify mydump element C O H

restart 10000 restart. C-H2O_*
# Start MD calculation #
run 500000
# End #
#####
#####
```

LAMMPS 的 data 文件

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# The header part, it typically contains a description of the file
# LAMMPS readable position file (atom style: full)
# Define number of atoms, types, bonds, and angles #

18012 atoms
7208 bonds
3604 angles

3 atom types
1 bond types
1 angle types
# System size in Angstrom #
    0.000 104.000 xlo xhi
    0.000 214.000 ylo yhi
    0.000 100.000 zlo zhi

Masses
1 12.011
2 15.999
3 1.008

Atoms
# Position information; atom-ID molecule-ID atom-type q x y z #
1 1 1 0.0 0.000000 1.212436 10.000000
2 1 1 0.0 0.700000 0.000000 10.000000
3 1 1 0.0 2.100000 0.000000 10.000000
.....
18010 2 2 -1.0484 48.250000 108.244845 71.250000
18011 2 3 0.5242 47.657170 107.505832 71.250000
18012 2 3 0.5242 47.657170 108.983867 71.250000

Bonds
# Position information; ID type atom1 atom2 #
```

LAMMPS 的 data 文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

```
1 1 6401 6402
2 1 6401 6403
3 1 6404 6405
.....
```

```
7206 1 17207 17209
7207 1 17210 17211
7208 1 17210 17212
```

Angles

```
# Angle information; ID type atom1 atom2 atom3 #
1 1 6402 6401 6403
2 1 6405 6404 6406
3 1 6408 6407 6409
.....
```

```
3602 1 17205 17204 17206
3603 1 17208 17207 17209
3604 1 17211 17210 17212
```

```
# End #
```

```
#####
#####
```

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

纳米水粒滴的自发包裹

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

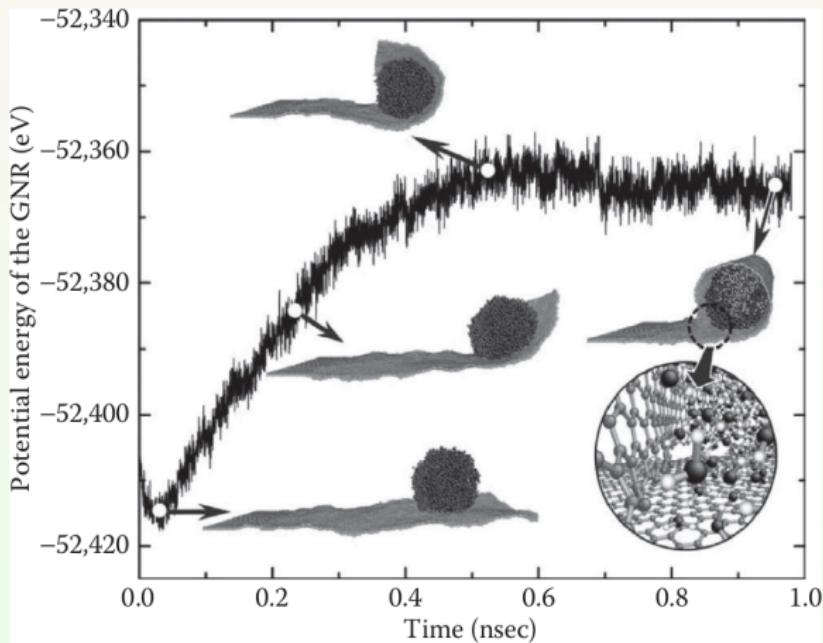


Fig.: Spontaneous wrapping of a water nanodroplet by the GNR.

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# in.CNT-tension.txt

### Basic setup ###
units metal
boundary f f p
# PBC on z boundary only
# p: periodic, f: non-periodic & fixed, s: non-periodic & wrap
# wrap: face position always encompasses the atoms
atom_style atomic

### Structure ###
read_data readdata.CNT
mass 1 12.01

region top block INF INF INF INF 0 45 units box
# units box; 0 A to 45 A
# to select the bottom 80 atoms (No. 1-80, see readdata.CNT)
region bottom block INF INF INF INF 116 161 units box
# units box; 116 A to 161 A
# to select the top 80 atoms (No. 1201-1280, see readdata.CNT)
# total box length in z = 161 A (see readdata.CNT)
# this creates 40 A vacuum at both ends of CNT

group g_cnt type 1
group g_top region top
group g_bottom region bottom
group g_boundary union g_top g_bottom
group g_body subtract all g_boundary

### Potential ###
pair_style airebo 2.5 1 0
pair_coeff * * CH.old.airebo C C
# for pure CNT, the old CH.old.airebo with 2.0 rcmin_CC works better.
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
### Calculation of stress ###
compute body_temp g_body temp
compute_modify body_temp dynamic yes
compute body_pe all pe/atom
compute body_st all stress/atom body_temp pair bond
compute strAll all reduce sum c_body_st[3]
compute strC g_cnt reduce sum c_body_st[3]
# c_body_st; compute body stress of zz in one column of array
variable szzC equal c_strC/(8.784*count(g_cnt))*(10^-4)
variable szz equal v_szzC

thermo 100
thermo_style custom step temp c_body_temp pe etotal pzz c_strAll vol
thermo_modify lost ignore norm yes

### NVE relaxation at 300 K ###
timestep 0.001

velocity g_body create 300 4928459 dist gaussian rot yes units box
velocity g_body zero linear
# zero; make g_body' s momenta zero by velocity adjust

fix 1 all nve
fix 2 g_body temp/berendsen 300.0 300.0 0.1
fix 3 g_boundary setforce 0.0 0.0 NULL
# top and bottom' s x, y fixed

dump relaxAll all custom 2000 relaxAll_*.dat id zs c_body_pe c_body_st[3]
fix 4 all ave/time 1 100 100 c_strAll file
stress_relax_All.dat
# In stress_relax_All.dat, z stress converges close to 0.
# 1 atm = 1.01325 bar = 1.01325 10^5 Pa = 1.01325 10^5 N/m^2
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的

均方位移

```
dump snapshotrelax all xyz 5000 CNT_relax_*.xyz
run 10000
write_restart restart.10000

undump relaxAll
undump snapshotrelax
unfix 3
unfix 4

#### Applying tension ####
reset_timestep 0
fix 3 g_boundary setforce 0.0 0.0 0.0
velocity g_bottom set 0.0 0.0 0.2 units box
velocity g_top set 0.0 0.0 -0.2 units box
# eng. strain rate = 0.005/ps, system length = 78.975 Å
# Tensional strain on both ends (top and bottom) of CNT = 0.4 Å/ps
# strain = timestep x strain rate
# lammps' s atomic stress must be divided by atomic volume.
# For crystal, atomic volume = atomic mass/density
# For solid deformation, need ionic radius or van der Waals radius.
# initial system V (40.5 40.5 80 Å^3).

dump tensileAll all custom 5000 CNT_tensile_*.dat id zs c_body_pe c_body_st[3]
dump snapshot all xyz 500 CNT_tensile_*.xyz
fix 22 all ave/time 1 100 100 c_strAll file stress_tensile_Body.dat
# total atomic stress of all atoms to have units of stress (pressure)
fix 33 all ave/time 1 100 100 v_szz file stress_tensile_GPa.dat
run 40000
write_restart restart.40000
#####
#####
```

LAMMPS 的 data 文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# LAMMPS data file
1280 atoms

1 atom types
0.000000 80.500000 xlo xhi
0.000000 80.500000 ylo yhi
0.000000 161.000000 zlo zhi

Masses

1 12.011000

Atoms

1 1 47.125494 40.250000 41.217088
2 1 46.975248 41.679496 41.217088
3 1 45.812391 44.291314 41.217088
.....
1278 1 47.087829 39.531315 119.782912
1279 1 46.788983 42.374644 119.782912
1280 1 46.204352 43.687747 119.782912
#####
```

碳纳米管的断裂模拟

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

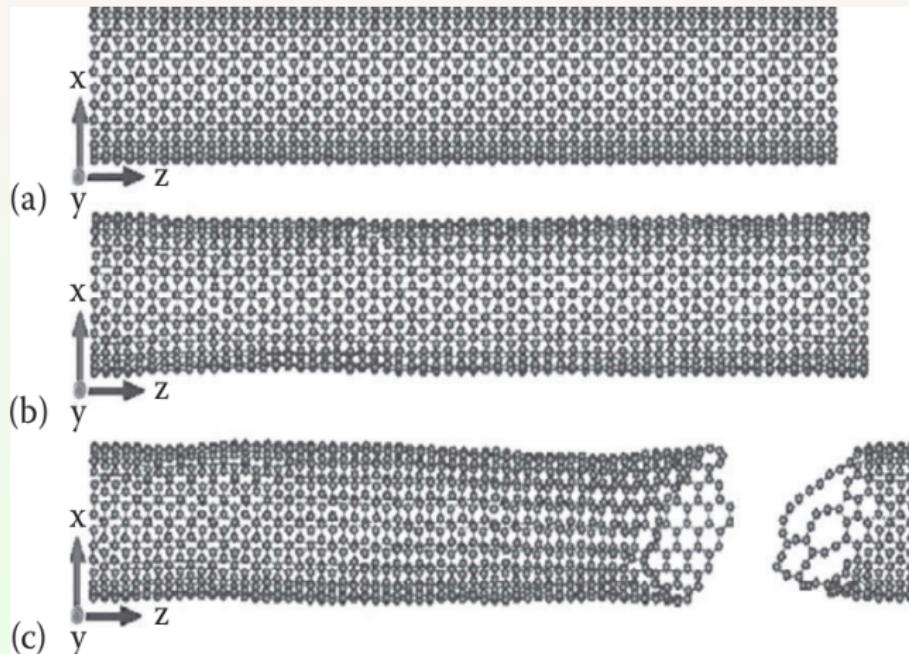


Fig.: Fracture of a CNT under tension at timesteps of 0 (a), 20,000 (b), 40,000 (c).

拉伸条件下碳纳米管的应力-应变

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$\text{ZrO}_2\text{-8-Y}_2\text{O}_3$ 的
均方位移

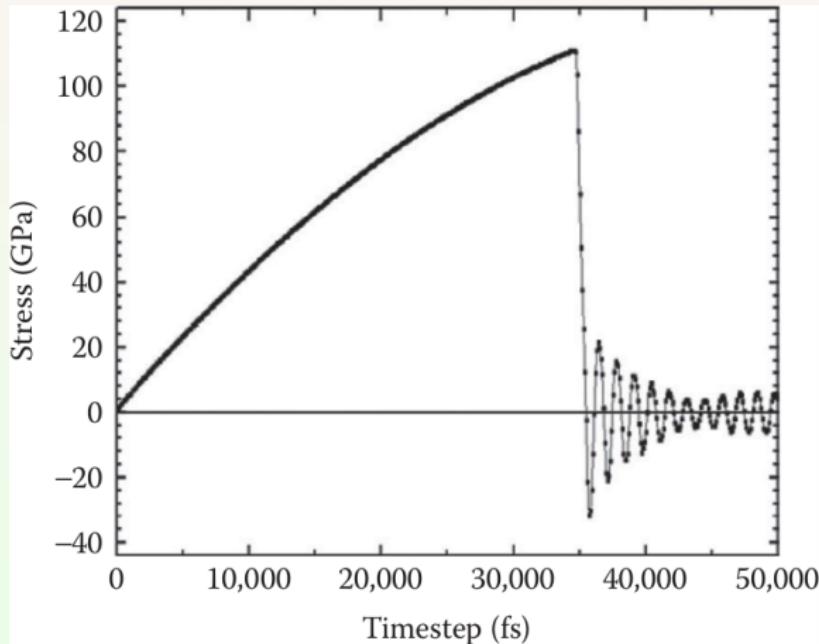


Fig.: Stress-strain curve of a CNT under tension.

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的均方位移

```
#####
# Si-smallCrack.txt
### Basic setup ####
units metal
boundary s s p
# p: periodic, f: non-periodic & fixed, s: non-periodic & wrap
# wrap: face position always encompasses the atoms
atom_style atomic

### Structure ###
lattice diamond 5.431
region box block 0 20 0 10 -0.5 0.5
create_box 5 box
# create five types of Si atoms in the box
create_atoms 1 box
# create type 1 atom in the box (other types will be set later)

mass 1 28
mass 2 28
mass 3 28
mass 4 28
mass 5 28

region 1 block INF INF INF 1.25 INF INF
group lower region 1
region 2 block INF INF 8.75 INF INF INF
group upper region 2
group boundary union lower upper
group mobile subtract all boundary
region leftupper block INF 2 5 INF INF INF
group leftupper region leftupper
region leftlower block INF 2 INF 5 INF INF
group leftlower region leftlower
set group leftupper type 2
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
set group leftlower type 3
set group lower type 4
set group upper type 5
# to see each group on VESTA, set 1 grey, 2 red, 3 blue, 4 green, 5 yellow

### Potential & Neighbor list ####
pair_style tersoff
pair_coeff * * SiC_Erhart-Albe.tersoff Si Si Si Si Si
# all atoms by sw potential, 5 types of Si
neighbor 1.0 bin
# neighbor list skin 1.0 thick with bin algo (scales linearly with N/P)
neigh_modify every 1 delay 5 check yes
# check any atom moved more than half the skin, list, delay 5 steps, list,.....

### Relaxation at 300 K ####
compute new mobile temp
velocity mobile create 300 887723 temp new

fix 1 all nve
fix 2 mobile temp/berendsen 300 300 0.1
# T for mobile region only, fixed upper & lower boundary
fix 3 lower setforce 0.0 0.0 0.0
fix 4 upper setforce 0.0 0.0 NULL
compute 1 mobile temp
compute_modify 1 dynamic yes

compute body_pe all pe/atom
compute body_st all stress/atom NULL pair bond
# compute the symmetric per-atom stress tensor for each atom
# ke or NULL, pair, and bond contributions

timestep 0.001
thermo 200
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
thermo_style custom step temp c_1 pe pzz vol
thermo_modify lost ignore norm yes
# if an atom is lost, ignore it and normalize data with the new number of atoms
dump snapshotrelax all xyz 5000 Si_smallCrack_relax_*.xyz

run 10000
write_restart restart.10000

undump snapshotrelax
unfix 3
unfix 4
### Applying tension ####
reset_timestep 0

fix 3 boundary setforce 0.0 0.0 0.0
velocity upper set 0.0 0.1 0.0
# x-dimension fixed, y- dimension extended
# 0.1 lattice unit = 0.5431 A/fs, 0.1 A/fs if units box
velocity mobile ramp vy 0.0 0.1 y 1.25 8.75 sum yes

fix 1 all nve
fix 2 mobile temp/berendsen 300 300 0.1
# T for mobile region only

fix 3 boundary setforce 0.0 0.0 0.0
compute strSi all reduce sum c_body_st[2]
# compute for the 2nd tensor yy out of 6

variable syySi equal c_strSi/(20.09*count(mobile))*(10^-4)
# atomic V = 20.09 (A^3) = 12.1 (cm3/mol), (10^-4) to convert GPa
variable syy equal v_syySi

### Run ###
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的均方位移

```
timestep 0.001
thermo 200
thermo_modify temp new
thermo_style custom step temp c_1 pe etotal pyy vol
neigh_modify exclude type 2 3
# pair interactions shut off between type 2 and 3 atoms to create a crack
fix 33 all ave/time 1 100 100 v_syy file Si_smallCrack_stress_GPa.dat

# save timestep vs. v_syy (GPa) data
dump 1 all atom 5000 Si.smallCrack.dat
dump 2 all xyz 5000 Si.smallCrack_*.xyz
# to visualize the snapshots on VESTA
dump 3 all atom 10 Si.smallCrack.lammpstrj
# to visualize the whole simulation on VMD

run 30000
#####
```

硅柱的断纹模拟

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

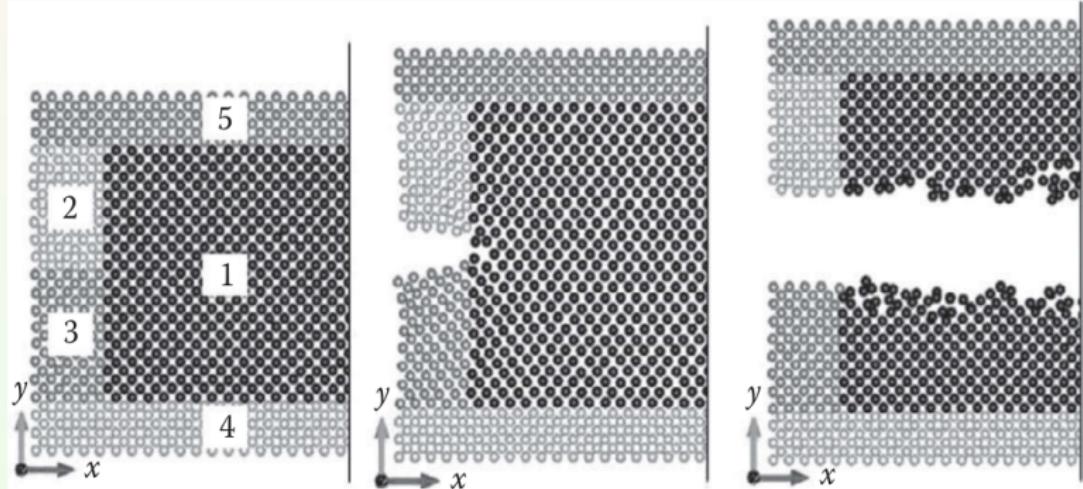


Fig.: Si bar with a small crack-initiating block under tension: at timesteps of 0 (a), 15,000 (b), 25,000 (c).

拉伸裂纹与硅柱的应力-应变

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

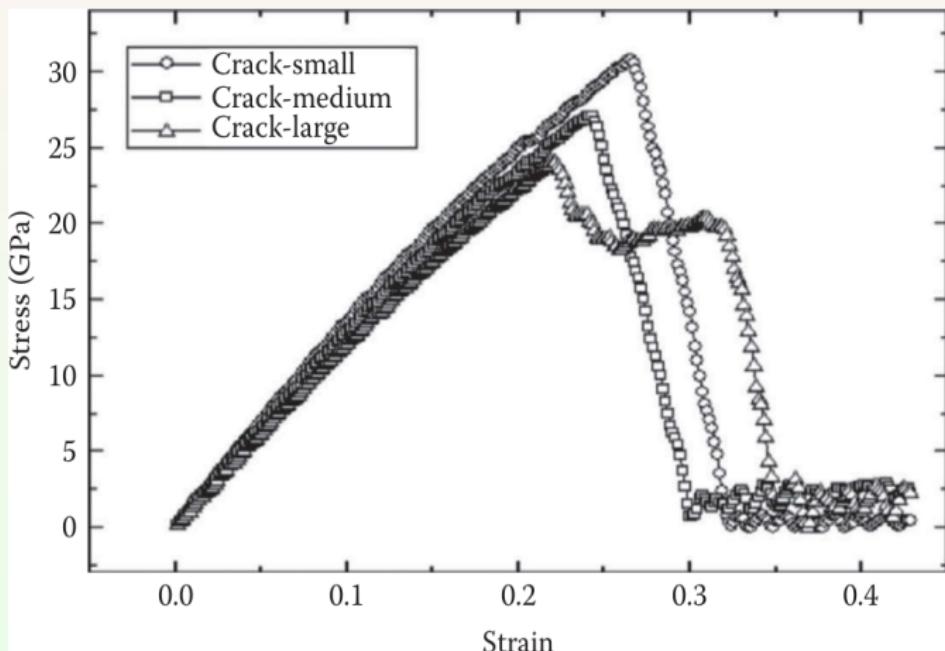


Fig.: Stress-strain curve of Si bars with various initial crack sizes.

硅-碳纳米管复合材料的设计

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

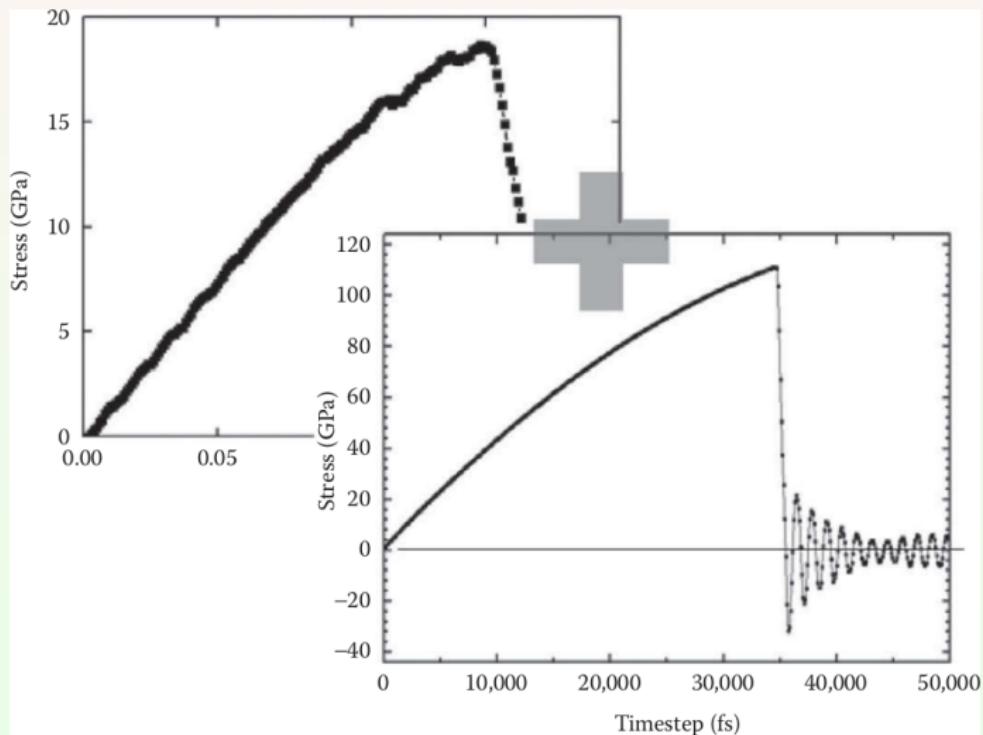


Fig.: Design concept for the Si-CNT composite system.



LAMMPS 的输入文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# in.Si-CNT-tension.txt

### Basic setup ###
units metal
boundary f p p
atom_style atomic

### Structure ###
read_data readdata.SiCNT
region box block 0 54.31 0 54.31 -54.31 54.31 units box
region 1 block INF INF INF INF INF -47.52125 units box
group lower region 1
region 2 block INF INF INF INF 47.52125 INF units box
group upper region 2
group boundary union lower upper
group mobile subtract all boundary
region leftupper block INF 16.293 INF INF 0 INF units box
region leftlower block INF 16.293 INF INF INF 0 units box
group leftupper region leftupper
group leftlower region leftlower

region void cylinder z 27.155 27.155 7.875 -36 36 units box
group CNT region void
# to delete_atoms in group void
group Sicrack union leftupper leftlower
group Siarround subtract mobile Sicrack

set group Siarround type 1
set group leftupper type 2
set group leftlower type 3
set group lower type 4
set group upper type 5
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
set group CNT type 6
# to identify each group on VESTA, set 1 grey, 2 red, 3 blue, 4 green, 5 yellow

### Potentials ###
mass 1 28
mass 2 28
mass 3 28
mass 4 28
mass 5 28
mass 6 12.01

pair_style hybrid airebo 2.5 1 0 tersoff lj/cut 5.5
pair_coeff 1 6 lj/cut 0.50 1.2
# Si-C(CNT) by lj, original value; 0.038 2.96
pair_coeff * * tersoff SiC_Erhart-Albe.tersoff Si Si Si Si Si NULL

# Si-Si by tersoff
pair_coeff * * airebo CH.airebo NULL NULL NULL NULL NULL C
# C(CNT)-C(CNT) by airebo
pair_coeff 2 * 5 6 none

neighbor 1.0 bin
neigh_modify every 1 delay 5 check yes

### Relaxation at 300 K ###
compute new mobile temp
velocity mobile create 300 887723 temp new

fix 1 all nve
fix 2 mobile temp/berendsen 300 300 0.1
# T for mobile region only, fixed upper & lower boundary

fix 3 lower setforce 0.0 0.0 0.0
fix 4 upper setforce 0.0 0.0 NULL
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
compute 1 mobile temp
compute_modify i 1 dynamic yes

compute body_pe all pe/atom
compute body_st all stress/atom NULL pair bond

timestep 0.001
thermo 200
thermo_style custom step temp c_1 pe pzz vol
thermo_modify lost ignore norm yes

run 10000
write_restart restart.10000

unfix 3
unfix 4

### Applying tension ####
reset_timestep 0

fix 3 boundary setforce 0.0 0.0 0.0
# x-dimension fixed, y-direction extended

velocity upper set 0.0 0.0 0.25 units box
velocity mobile ramp vz 0.0 0.25 z -47.52125 47.52125 sum yes units box

compute strCNT CNT reduce sum c_body_st[3]
compute strSi mobile reduce sum c_body_st[3]
compute strSiCNT all reduce sum c_body_st[3]

variable szzSi equal c_strSi/(20.09*count(mobile))*(10^-4)
variable szzCNT equal c_strCNT/(8.784*count(CNT))*(10^-4)
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的均方位移

```
variable szz equal "v_szzSi + v_szzCNT"
# variable szzAl equal c_strAl/(16.60*count(g_al))*(10^-4)
# atomic volume = 20.09 (A^3) = 12.1 (cm3/mol)*(10^-4) to convert GPa
# compute for the 2nd tensor yy out of 6

neigh_modify exclude type 2 3
# to initiate crack, pairwise interactions are shut off

dump 1 all atom 5000 SiCNT.crack.dat
dump 2 all xyz 5000 SiCNT_*.xyz

fix 33 all ave/time 1 1000 1000 v_szz file stress_tensile_GPa.dat
run 160000
write_restart restart.160000
#####
```

硅-碳纳米管复合材料的初始结构

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

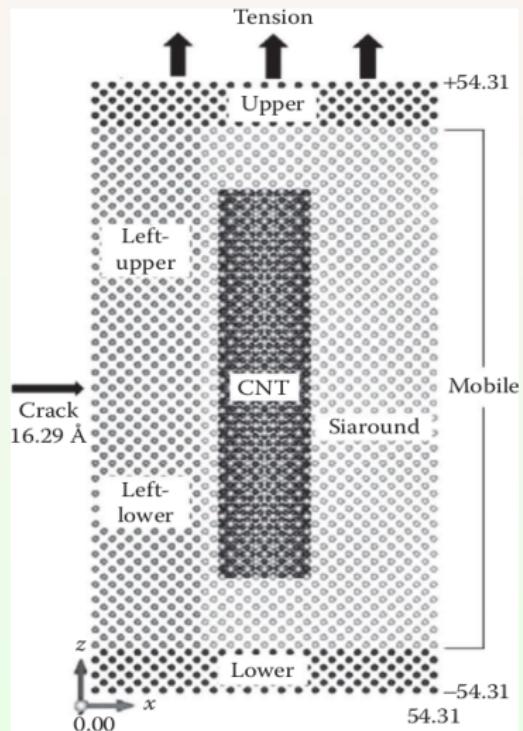


Fig.: Starting structure of the Si-CNT composite system.

LAMMPS 的 data 文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
# LAMMPS data file

17081 atoms

6 atom types

-10.000000 64.310000 xlo xhi
0.000000 54.310000 ylo yhi
-64.310000 100.000000 zlo zhi

Masses

1 28
2 28
3 28
4 28
5 28
6 12.01

Atoms

1 4 0 0 -54.31
2 4 0 2.7155 -51.5945
3 4 2.7155 0 -51.5945
4 4 2.7155 2.7155 -54.31
5 4 1.35775 1.35775 -52.9522
6 4 1.35775 4.07325 -50.2368
.....
#####


```

硅-碳纳米管复合材料的原子间相互作用

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的

均方位移

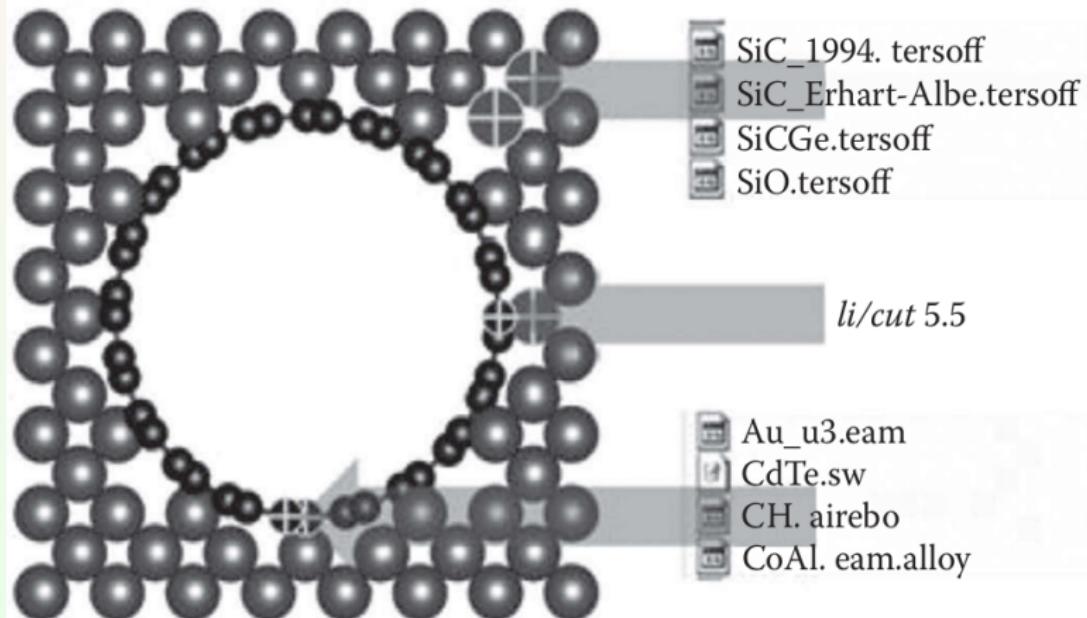


Fig.: Three potentials adopted for the study to describe Si, CNT, and their interface.

硅-碳纳米管复合材料的拉伸过程

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

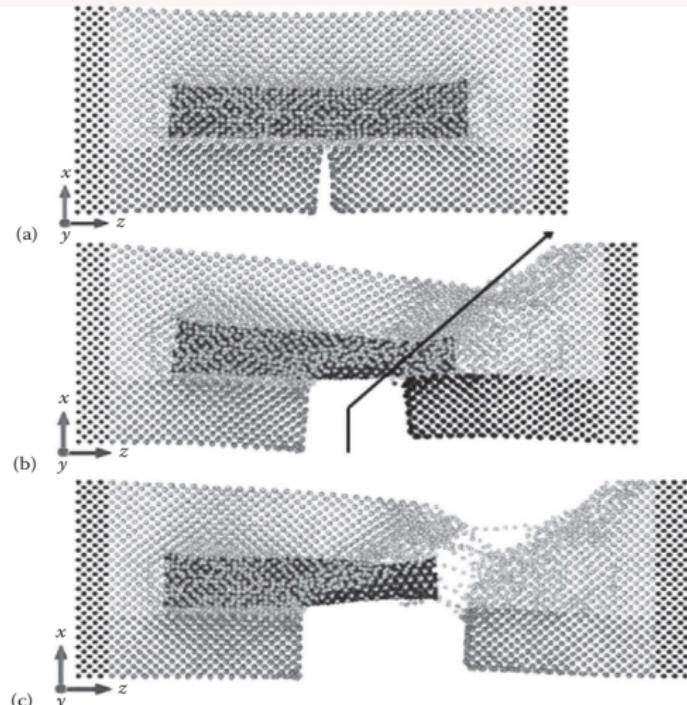


Fig.: Snapshots of the Si-CNT composite system with $\epsilon = 0.5\text{eV}$ under tension for various strains: 10.5% (a), 31.5% (b), 42% (c).

硅-碳纳米管复合材料拉伸的应力-应变



LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂
铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

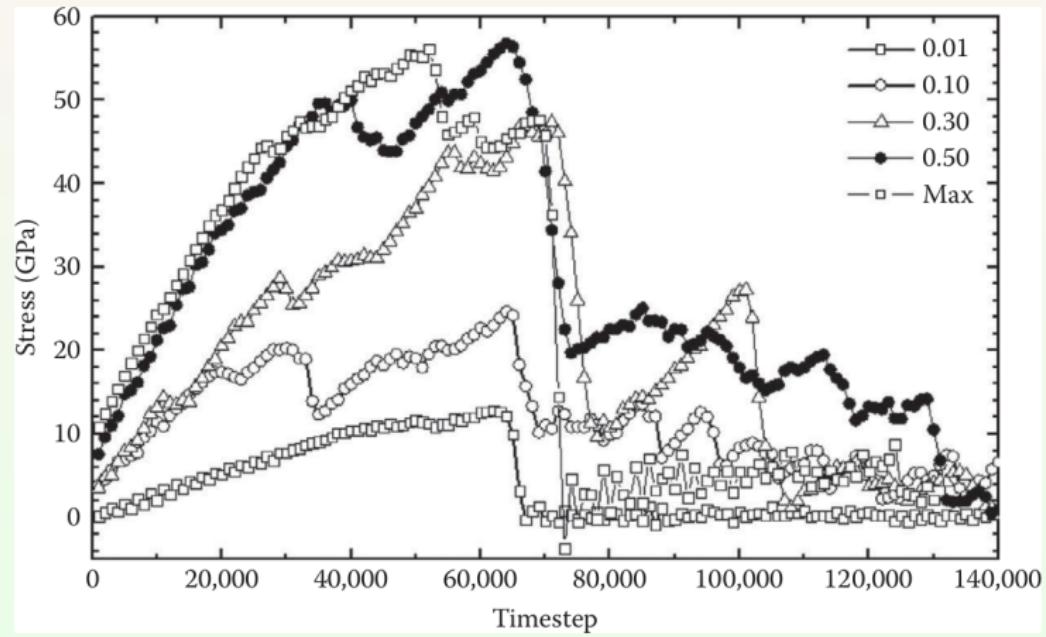


Fig.: Stress-strain curves of the Si-CNT nanocomposites with various interfacial bonding strengths.

LAMMPS 的输入文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
### Basic setup #####
variable t equal 2000
units metal
dimension 3
boundary p p p
atom_style charge
newton on

### Structure ###
read_data ZrO2.data
neighbor 3 bin
comm_modify vel yes

### Potentials ###
# Zr-O and O-O: A. Dwivedi, A. N. Cormack, Philos. Mag. A 1990, 61, 1.
# Y-O: G. V. Lewis, C. R. A. Catlow, J. Phys. C 1985, 1149.
kspace_style ewald/disp 1e-4
pair_style buck/coul/long 10
pair_coeff * * 0.00 10 0.00
pair_coeff 1 2 985.9499 0.3760 0.000000
# A. Dwivedi, A. N. Cormack, Philos. Mag. A 1990, 61, 1.
pair_coeff 2 2 22762.26 0.1490 27.8931
# A. Dwivedi, A. N. Cormack, Philos. Mag. A 1990, 61, 1.
pair_coeff 2 3 1345.212 0.3491 0.00000
# G. V. Lewis, C. R. A. Catlow, J. Phys. C 1985, 1149.

### Group ###
group Zr type 1
group O type 2
group Y type 3

### Minimization ###
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断
裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
thermo 100
thermo_style custom step time vol atoms temp ke pe lx press
fix 1 all box/relax iso 0.0 vmax 0.001
min_style cg
minimize 1e-25 1e-25 100000 100000
unfix 1

### NPT1 ####
reset_timestep 0
dump 1 all xyz 1000 YSZ_xyz_NPT1_$t
dump 2 all atom 1000 YSZ_atom_NPT1_$t
thermo 1000
thermo_style custom step dt time atoms temp ke pe vol press lx ly lz
velocity all create $t 78432 dist gaussian
fix NPT all npt temp $t $t 10 iso 1.013 1.013 100 drag 0.2
timestep 0.001
run 250000

undump 1
undump 2

### Mean square displacement ####
reset_timestep 0
compute msd 0 msd com yes
fix vec all vector 1 c_msd

### NPT2 ####
dump 1 all xyz 1000 YSZ_xyz_NPT2_$t
dump 2 all atom 1000 YSZ_atom_NPT2_$t
thermo 1000
thermo_style custom step temp ke pe vol press lx c_msd[4]
timestep 0.001
```

LAMMPS 的输入文件 (cont.)

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的均方位移

```
run    500000

unfix  vec
unfix  NPT
undump 1
undump 2
uncompute msd#####
#####
```

ZrO₂-8Y₂O₃ 的结构

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂
的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

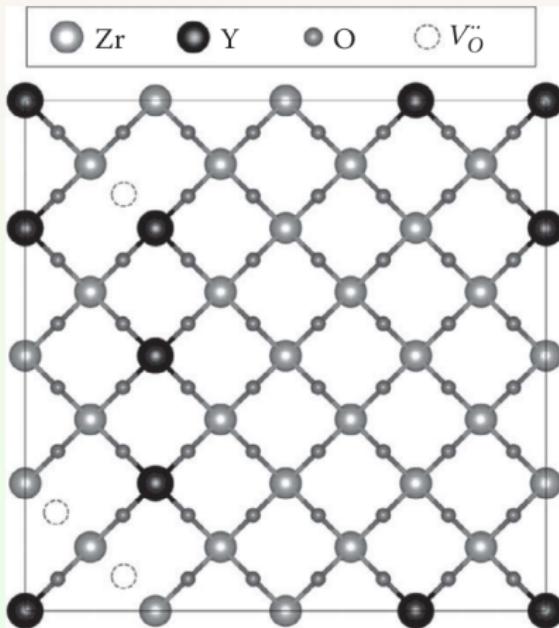


Fig.: Sliced structure of the ZrO₂-8Y₂O₃ system showing a metal (Zr and Y) layer and an oxygen layer along the [001] direction.

LAMMPS 的 data 文件

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料的拉伸

ZrO₂-8-Y₂O₃ 的
均方位移

```
#####
YSZ
```

```
755 atoms
```

```
3 atom types
```

```
0.0 20.5200004578 xlo xhi
0.0 20.5200004578 ylo yhi
0.0 20.5200004578 zlo zhi
```

```
Masses
```

```
1 91.22400
2 15.99940
3 88.90585
```

```
Atoms
```

```
1 2 -2 1.2825000290 1.2825000290 1.2825000290
2 2 -2 3.8475000860 3.8475000860 1.2825000290
3 2 -2 3.8475000860 1.2825000290 3.8475000860
.....
```

```
753 3 3 15.3900003430 10.2600002290 15.3900003430
754 3 3 5.1300001140 15.3900003430 15.3900003430
755 3 3 10.2600002290 17.9550004010 17.9550004010
#####
#
```

均方位移 (Mean-Squared Displacement, MSD)

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

$\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$ 的
均方位移

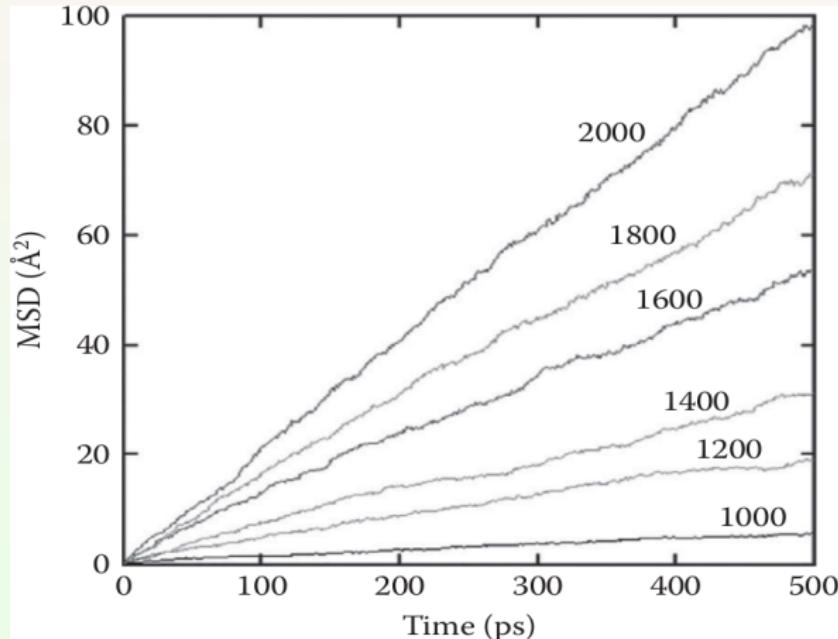


Fig.: MSD plot with time in the range of the last 500,000 timesteps at various temperatures from 2,000 to 1,000 K.

主要参考文献

LAMMPS
算例举要

LAMMPS
常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力下的形变

模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断

裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯

纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料

的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的

均方位移

- [1] <https://github.com/mrkllntschpp/lammps-tutorials>
(LAMMPS 基本计算出处)
- [2] J.-G. Lee, *Computational Materials Science: an introduction* (2nd Edition), CPC Press, (2017)
(LAMMPS 模型算例出处)
- LAMMPS 常用的可视化软件:
- [3] <http://li.mit.edu/Archive/Graphics/A/#download>
- [4] <https://imagej.net/ij/download.html>
- [5] <https://www.ovito.org/os-downloads/>
- [6] <https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD>

LAMMPS 算例举要

LAMMPS 常用命令

基本计算

能量最小化

状态方程

拉伸与压力建模
模拟

模拟晶界的形成

拉伸晶界直至断裂

铁的对称倾转晶界断裂的原子模拟

长链聚合物行为模拟

模型算例

金纳米线的断裂模拟

纳米水粒滴被石墨烯
纳米带的自发包裹

碳纳米管的拉伸

硅柱的拉伸裂纹

硅-碳纳米管复合材料
的拉伸

$ZrO_2\text{-}8\text{-}Y_2O_3$ 的
均方位移

谢谢大家！