

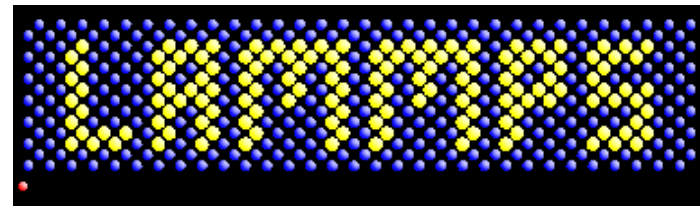
12月2日上机实习安排

LAMMPS软件中ReaxFF力场的使用：

1. 自行安装LAMMPS软件的Windows版本
2. Iron Clusters Embedded in Graphene Nanocavities:
Heat-Induced Structural Evolution and Catalytic C–C
Bond Breaking

LAMMPS软件的简介

- LAMMPS: Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
- 由美国能源部两个实验室发布(free and open-source)
- MD, MC → 从原子尺度到介观尺度
- CPU, GPU皆可, 可并行
- 易于扩展, eg: 添加力场方便
- 一个脚本可运行一个或多个模拟
- 非图形化界面
- 官网: <http://lammps.sandia.gov/>



LAMMPS输入文件

- 初始结构文件——data文件
- 模拟控制文件——in文件(input script)

1. Initialization

2. Atom definition

3. Settings

4. Run a simulation

- ✓ 每行命令中的不同字段由空格或者制表符分隔开来，每个字段可以由字母、数字、下划线、或标点符号构成；
- ✓ 每行命令中第一个字段表示命令名，之后的字段都是相关的参数；eg: units lj/real/metal/si/cgs
→units metal

LAMMPS输入文件

- ✓ 注意：lammmps里很多命令都有自己的默认设置，很多命令都是在需要修改默认值的情况下才特别设置的。
- ✓ 每行后的“&”表示续行（类似fortran），“#”表示注释，\$是跟声明变量有关的；
- ✓ 每一非空行都被认为是一条命令（**大小写敏感**，极少有命令或参数大写的）；
- ✓ 读入一行执行一行，有些命令在其他命令后有效，有些命令要用到其他命令的输出；比如，要设定一组原子的温度，需要先用group命令定义哪些原子属于这个组才行；
- ✓ in文件中各命令的**顺序**可能会对计算产生影响，但大部分情况下不会有影响；

LAMMPS输出文件

- log.lammps文件——记录了整个计算过程屏幕上显示的所有信息
- dump文件——输出应力、能量、原子位置、速度等，由dump命令控制输出文件，eg: xyz文件
- restart文件——断点续算文件，由write_restart命令控制。

data文件实例

Fe13 AC interacting with graphene edge

395 atoms

原子个数

2 atom types

原子类型

0 34.0867 xlo xhi

0 34.4400 ylo yhi

0 50.0000 zlo zhi

Slab Model大小

Masses

1 12.0107

2 55.8452

原子摩尔质量

Atoms

原子序号 原子类型 电荷 原子坐标(x, y, z)

1 1 0.0 7.366430000 11.931600000 29.905000000

2 2 0.0 0.202289000 12.728100000 11.926800000

3 2 0.0 10.202289000 22.728100000 20.926800000

2019/12/2

.....

陈爽 匡亚明学院

in文件实例

13-AC

1. Initialization

units real #能量单位
newton on #turns Newton's 3rd law on or off for
pairwise and bonded interactions
dimension 3 #模拟盒子的维度
boundary p p p #盒子三个方向都是周期性的

2. Atom definition

atom_style charge #模拟中原子处理类型（带电荷的）
read_data data.13-AC #读取结构data文件
pair_style reax/c Imp_control #用ReaxFF处理pairwise
interaction
pair_coeff * *ffield.reax.Fe_O_C_H C Fe #不同元素pairwise
的力场参数

in文件实例

3. Settings

neighbor 2.0 bin #building of neighbor list 距离 算法
neigh_modify every 10 delay 0 check no #building and
use of neighbor list
fix 1 all qeq/reax 1 0.0 10.0 1.0e-6 reax/c #Qeq方法处理电
荷结合ReaxFF

in文件实例

4. Run a simulation with output (thermo & dump)

```
thermo      1
dump        1 all xyz 1 Fe13-AC-min.xyz
log         Fe13-AC-30ps.log.lammps
minimize 1.0e-12 1.0e-12 1000 1000
min_style cg
min_modify  dmax 0.2
undump 1
```

Geometry
Optimization

in文件实例

4. Run a simulation with output (thermo & dump)

timestep 0.1

run_style verlet

fix 2 all nvt temp 1173.15 1173.15 1.0

thermo 10

thermo_style custom time temp press pe ke etotal enthalpy

dump 2 all xyz 10 Fe13-AC-30ps-MD_1.xyz

run 100000

unfix 2

undump 2

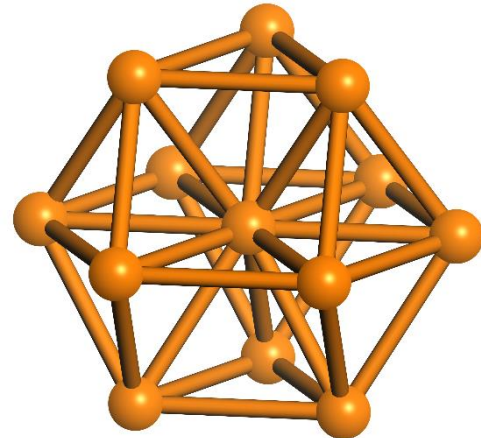
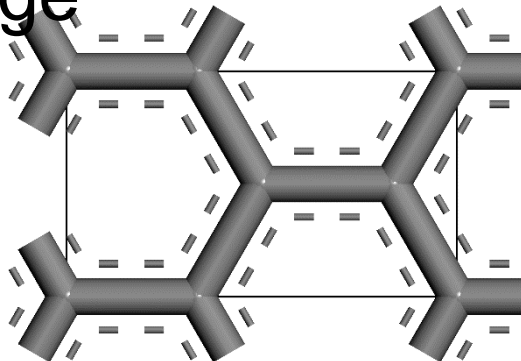
fix 3 all nvt temp 1173.15 1173.15 1.0

thermo 10

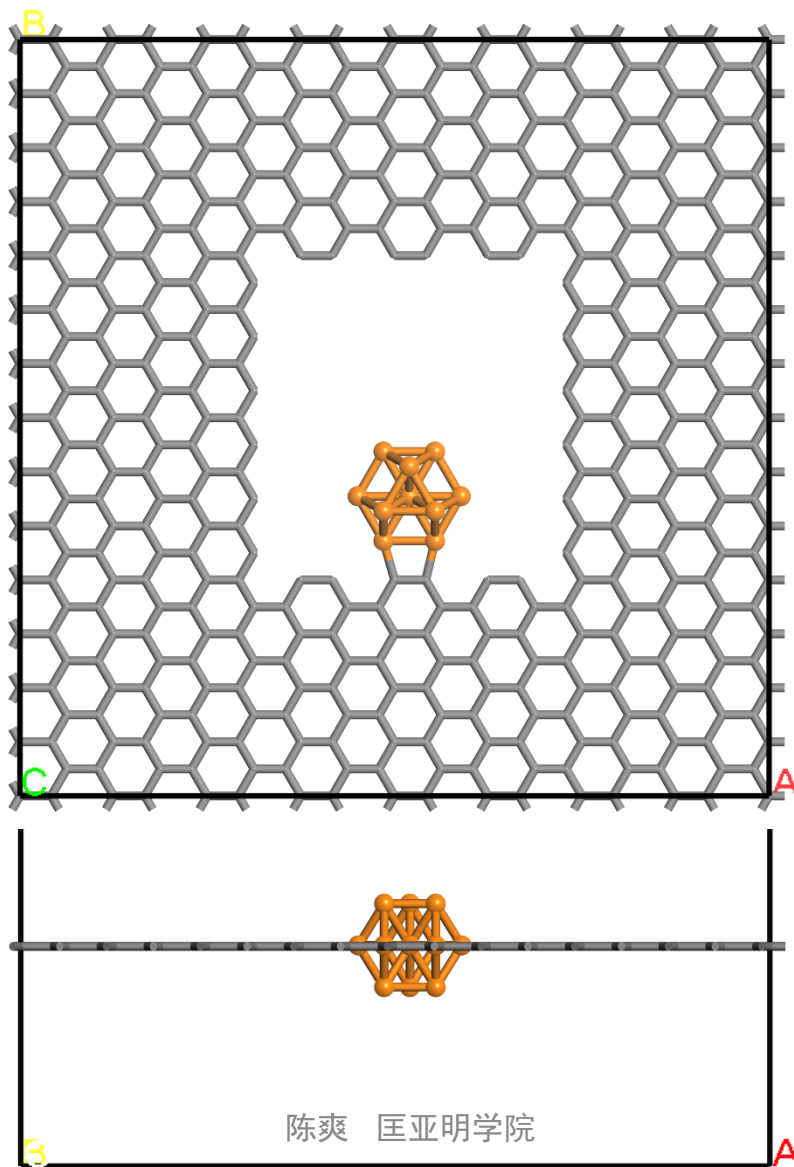
} MD

Model Building

- Rectangular slab model of graphene (super cell: 8×14)
- Cut C atoms to generate square nanocavity
- Cut high-symmetry HCP Fe_{13} cluster based on HCP Fe bulk
- Deposit Fe_{13} cluster to contact with armchair edge



Model Building



模拟的实施

- Generate data file based on ***.car** file from MS model building
- **NVT** ensemble: **1173.15 K + 5 ps**
- Put **data**, **in**, **ffield.reax.FC**, and **Imp_control** files into E:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20170127\bin
- 运行cmd (**WIN键+R**)
- 往下输入命令:
 - ✓ **C:**
 - ✓ **cd C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20170127\bin**
 - ✓ **set OMP_NUM_THREADS=2**
 - ✓ **Imp_mpi.exe < in file name** (**在C盘不能运行更改bin文件夹权限**)
- xyz轨迹文件可用VMD软件读取

C盘Bin文件夹权限的更改

右击bin文件夹→属性→安全→高级→更改→
输入要选择的对象名称：**everyone** →确定
→勾选：

1. 替换子容器和对象的所有者
 2. 使用可从此对象继承的权限项目替换所有子对象的权限项目
- 确定