

LAMMPS 计算流程

上一篇生成data文件后，模型已经基本建立，下面讲一下LAMMPS计算参数的设定。分子动力学模拟的一般过程为：建模 =》 能量最小化 =》 平衡 =》 迭代观察所研究的性质。我们所研究的REAXFF反应力场主要研究化学反应，为了保证反应开始前系统达到平衡状态，我们先使用CVFF力场进行平衡（不反应），再改为REAXFF力场研究反应。

CVFF力场：能量最小化和平衡

CVFF力场的input文件如下：

```
#cvff
##### 设置cvff力场
units          real
atom_style     full
kspace_style   ewald 1e-4
pair_style      lj/cut/coul/long 10 8
bond_style     harmonic
angle_style     harmonic
#####读取模型，给予初始速度
read_data      20c.data
velocity       all create 60.0 4928459 mom yes dist gaussian
timestep       0.25
thermo         10000
#####能量最小化
fix            1 all nve
fix            2 all temp/berendsen 30.0 30.0 100.0
timestep       0.25
minimize       1.0e-6 0.001 1000 10000
dump           1 all atom 1000 cvff.trj
##### 平衡
unfix          2
velocity       all create 6000.0 4928459 mom yes dist gaussian
fix            3 all temp/berendsen 3000.0 3000.0 100.0
run            1000000
#####输出平衡的模型，退出
write_data     20c_equil.data
quit           1
```

□
□

REAXFF力场：进行反应

```
#reaxff
#####读取模型，设置力场参数
```

```
units          real
atom_style      full
read_data       AE.data
pair_style       reax/c lmp_control
pair_coeff       * * ffield.reax.cho  C H O
#####控温3000K
fix            1 all nvt temp 3000.0 3000.0 100.0
fix            3 all qeq/reax 1 0.0 10.0 1e-6 param.qeq
thermo         10000
timestep        0.1
dump           1 all atom 1000 ae.trj
#####设置循环，每100万步输出一次restart文件
variable        i loop 10
label          lp
run            1000000
write_restart    $im.restart
next           i
jump           SELF lp
quit           1
```