

# 2017年4月23日 工作记录

- 如何在平衡之前禁止反应
- 调研联系超算中心

## 1. 平衡前禁止反应

想法起源于这句话

1. 《ReaxFF Reactive Force Field for Molecular Dynamics Simulations of Hydrocarbon Oxidation》

During the equilibration simulations, the C-O and H-O bond parameters were switched off to prevent reactions from occurring during the equilibration of the system.

2. 清华大学毛倩学姐

要控制键的断裂需要修改forcefield文件，一般情况下100万步的小分子的relaxtion不会发生键的断裂。

3. [LAMMPS mail lists](#) 这封信内容大概是，询问如何进行非反应 (non-reactive) MD以进行平衡。回信提出两个方法：

- 设置一条限制命令 `special_bonds lj/coul 1.0 1.0 1.0` 通过开关这条命令控制反应。但是准确性待定。
- playing around with the force field parameters may work, too, but requires a sufficiently deep understanding of ReaxFF and the meaning of individual parameters.

上周我又重新读了一下《ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons》这篇，还是不能理解。

4. 利用cvff力场先进行平衡，随后加入reaxff力场，可以实现。