

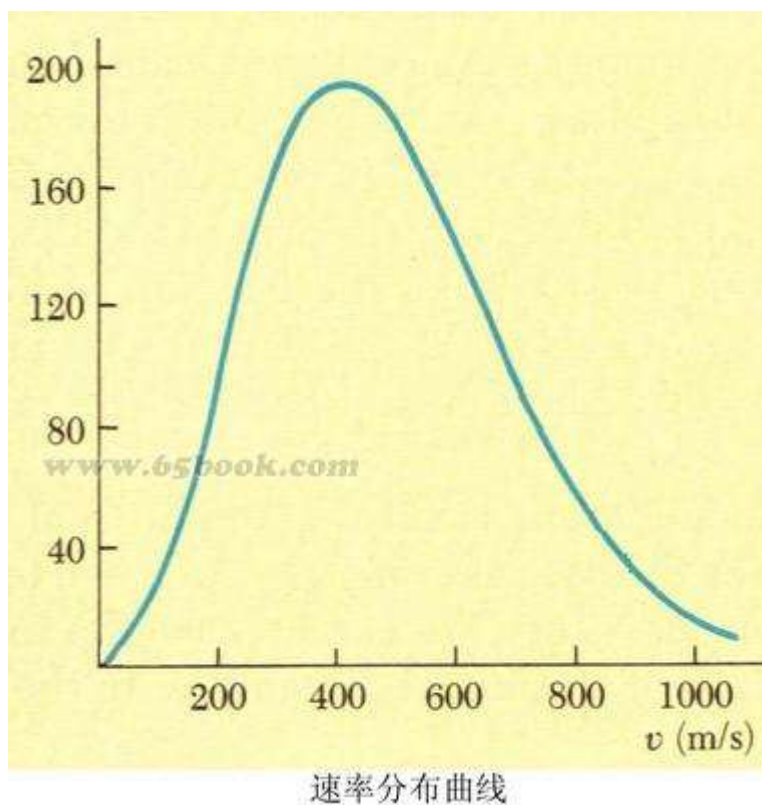
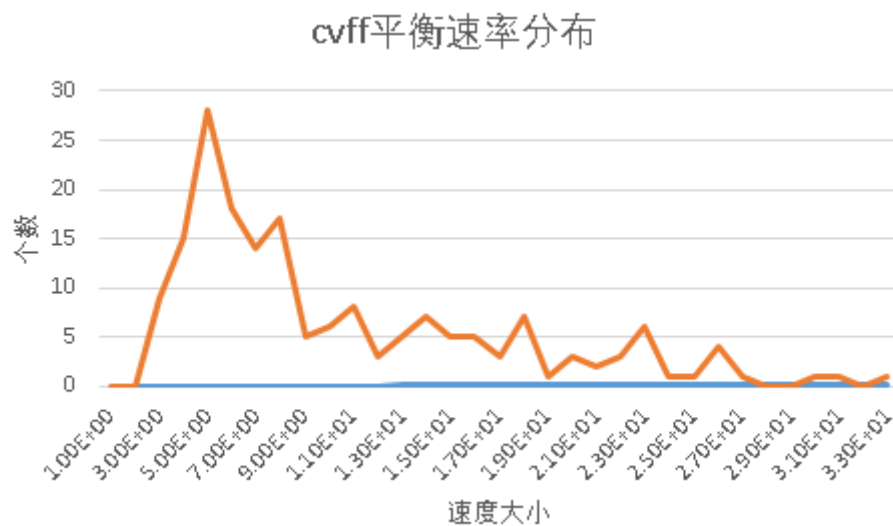
LAMMPS 计算流程

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
```