

LASP 使用入门9 – 分子动力学MD（一）初步

分子动力学模拟：通过控制有限温度和压强，利用牛顿力学演化体系，得到常见物理化学性质，如熔点

两种最重要的系综

NVT 正则系综：固定粒子数（ N ），体积（ V ），温度（ T ） 常见方法：Nose-Hoover 热浴

NPT 等热-等压系综：固定粒子数（ N ），压强（ P ），温度（ T ） 常见方法：Parrinello-Rahman 压力浴

LASP 使用入门9 – 分子动力学MD（一）初步

LASP 关键词 explore_type:



NPT 可变晶包

explore_type npt

NVT 不变晶包

explore_type nvt

```
MD.dt          1    fs
MD.tttotal     1000000    fs
MD.realmass    T
MD.target_T    1240    K
MD.nhmass      100.00
MD.prmass      100.00
MD.target_P    0.0000
MD.print_freq  1
MD.print_strfreq 100
MD.Lpericonstr T
```

MD的相关参数1

MD.dt 一般是 **1** (**fs**)

温度越高，震动剧烈，**dt**需要更小些

MD.target_T 目标温度 (**K**)

MD.target_P 目标压强 (**GPa**)

MD.tttotal **MD**模拟总时间 **fs**

LASP 使用入门9 – 分子动力学MD（一）初步

MD的相关参数2（输出相关）

MD.print_freq	输出文件（lasp.out）打印结果频率 Lasp.out 输出实时的能量、温度、体积等信息
MD.print_strfreq	输出文件(md.arc)打印结果频率 md.arc输出实时的结构轨迹
MD.Lpericonstr F	是否进行周期性归一 原子分数坐标回到（0，1）间
MD.Lrestart F	是否利用md.restart 文件重启模拟

LASP 使用入门9 – 分子动力学MD（一）初步

MD的重要控制参数3

注意：在时间足够长，系统守恒条件下，参数原则上不应该影响最后的系统取样和结果

控温和控压的关键词

MD.nhmass **1000** 温度浴 摩擦质量 **eV fs²**

MD.prmass **1000** 压力浴 摩擦质量

质量越小，波动越剧烈，达到平衡越快

常见参数范围 **100~2000**

可以通过观察轨迹的温度和体积波动, 调节参数

LASP 使用入门9 – 分子动力学MD (一) 初步

LASP 输出文件 lasp.out:

注意：MD守恒量必须波动很小，采样才有意义

体系势能

实时温度

实时内压

实时体积

MD守恒量

	Time_fs	Ene_eV	Temp_K	Pres_GPa	kine	kin_t	kin_p	pot_t	pot_p	vol	Conserv_Ene
istep	0	-150.6216	972.1	-0.39	7.92	0.01	1.78	-2.13	0.00	2437.4	-143.04472
istep	5	-150.4703	1020.8	-0.64	8.31	0.01	1.65	-2.55	0.00	2458.4	-143.04535
istep	10	-150.2151	1059.4	-0.55	8.63	0.00	1.39	-2.85	0.00	2450.7	-143.05254
istep	15	-150.0166	1048.4	-0.54	8.54	0.01	1.20	-2.78	0.00	2447.9	-143.05845
istep	20	-149.9895	993.2	-0.95	8.09	0.01	1.25	-2.42	0.00	2476.2	-143.05985
istep	25	-149.8415	945.2	-1.34	7.70	0.00	1.18	-2.09	0.00	2509.4	-143.05500
istep	30	-149.5844	946.2	-1.33	7.70	0.00	0.93	-2.10	0.00	2511.1	-143.05017
istep	35	-149.3171	993.1	-1.13	8.09	0.01	0.61	-2.44	0.00	2498.2	-143.05036
istep	40	-149.2751	1043.8	-1.23	8.50	0.01	0.55	-2.33	0.00	2506.6	-143.05246

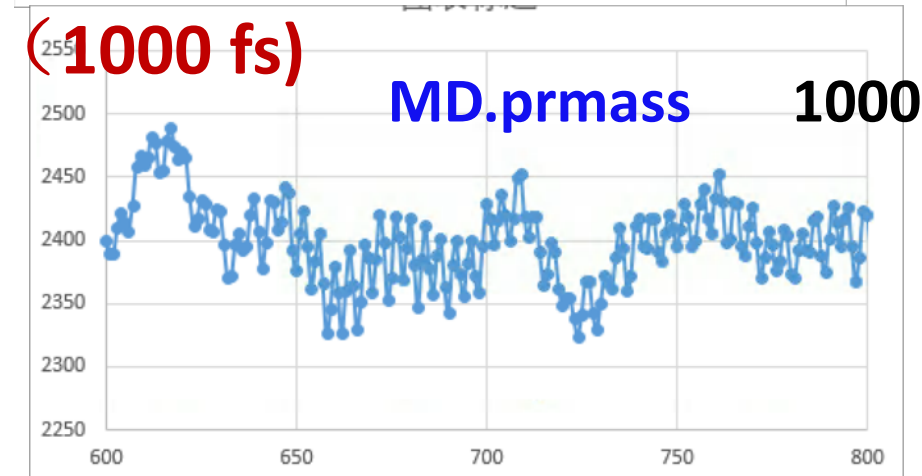
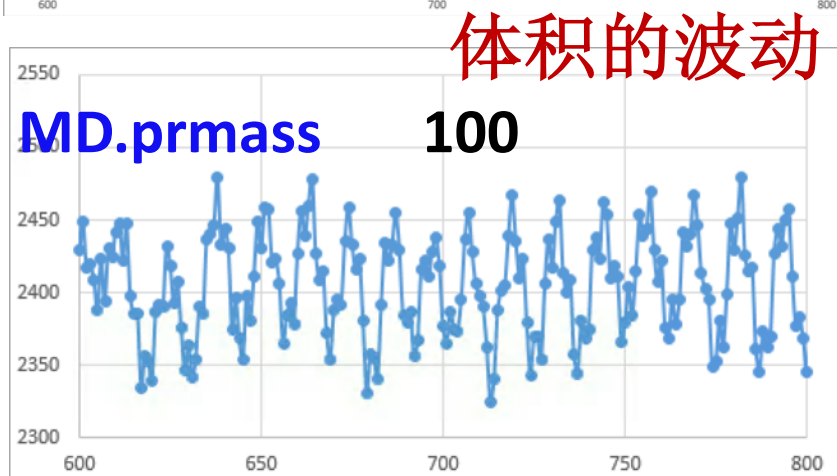
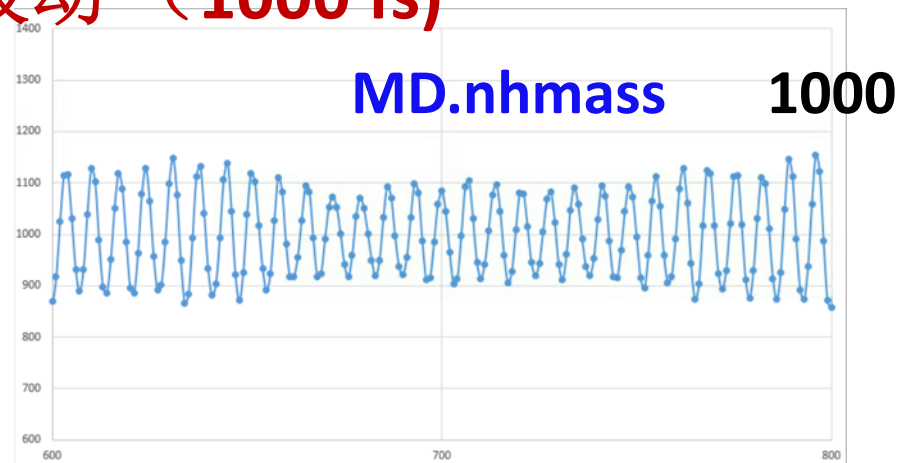
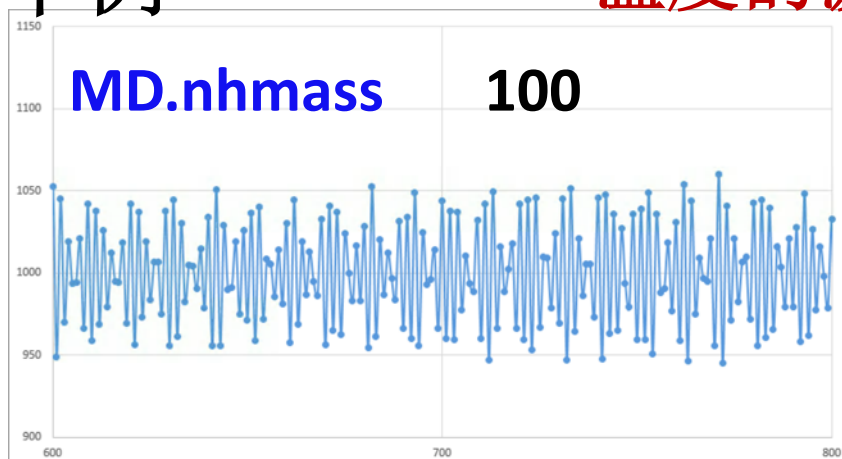
体系动能

热浴和压力浴动能和势能

LASP 使用入门9 – 分子动力学MD (一) 初步

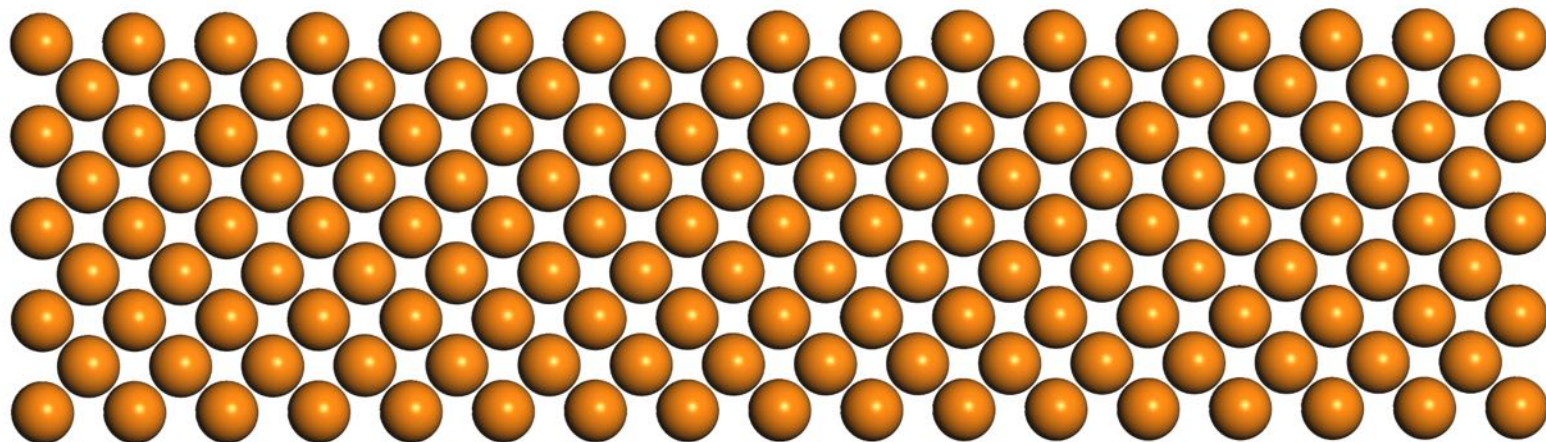
举例

温度的波动 (1000 fs)



LASP 使用入门9 – 分子动力学MD（一）初步

MD 计算固体的熔点

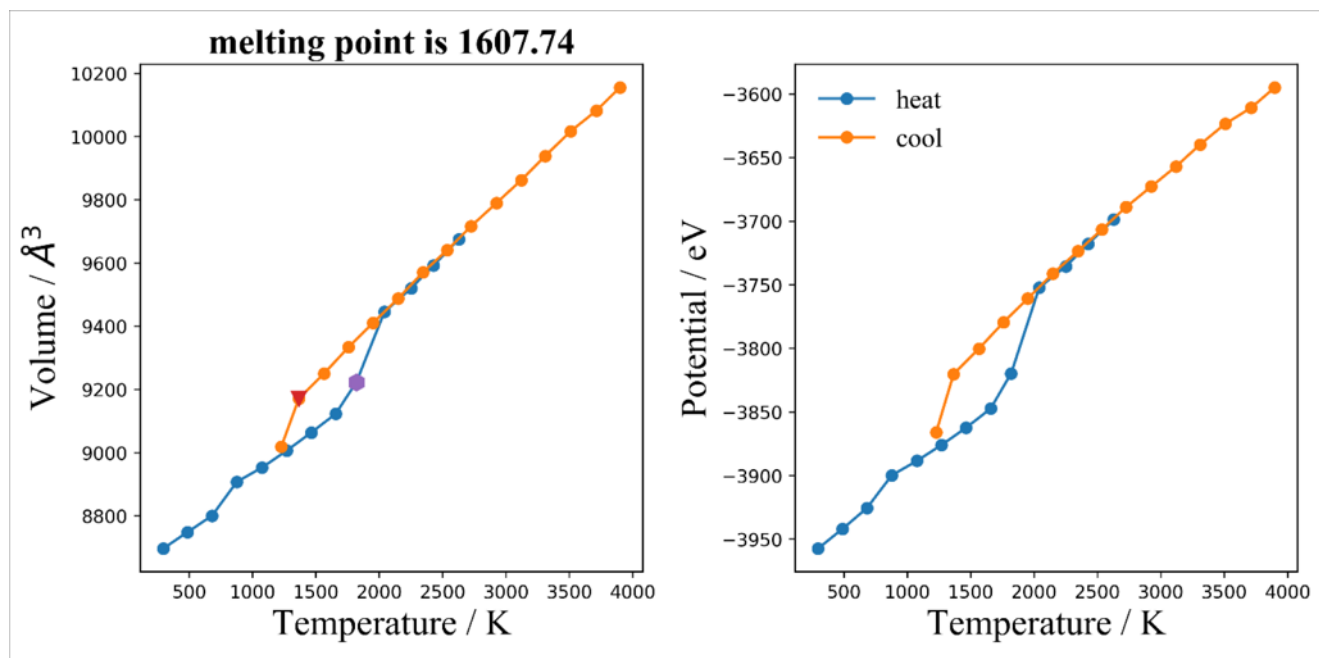


- Starting from bcc-Ti, $a=b=13.239 \text{ \AA}$, $c = 47.207 \text{ \AA}$
- each run with 5 ps for equilibrium, and 20 ps for production
- NPT ensemble

LASP 使用入门9 – 分子动力学MD (一) 初步

Melting curve of Ti

A bit lower than
experiment (1900 K)



$$T_+ = 1818.62 \text{ K}, T_- = 1364.26 \text{ K}, T_m = 1607.74 \text{ K}$$