

综合训练

链接: https://pan.baidu.com/s/1YtenrAcd_UelCva5m5_zeA

提取码: jemf

1. 解压后, 创建名为test的文件夹, 将CH.airebo、input_final及gra.data三个文件复制到test文件夹中;
2. 进入test文件夹中, 运行lammmps程序 (`lmp_mpi <input_final`), 约半分钟即可运行结束;
3. 使用VMD和OVITO分别查看生成的tension.xyz和tension.dump文件, 熟悉PPT中讲的关于两种软件的操作, 保存图片, 制作动画;
4. 将生成的force_position文件导入到Origin中, 第一行为无效信息, 从第二行开始, 第一列表示x方向盒子大小 (单位 Å), 第二列表示x方向拉力 (单位 N/m), 参考PPT中讲解绘制应力应变曲线, 并导出为eps格式图片;
5. 将eps文件导入到AI中, 进行相应修改, 得到最终图片。