

 winmostar チュートリアル

# LAMMPS

## 膨張係数計算

V11.1.1

2022年5月28日 株式会社クロスアビリティ

# 本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

# 概要

- 本チュートリアルでは、Si結晶(1,0,0)面の1,000 Kにおける線膨張係数を計算する方法を紹介します。800 Kから1200 Kに温度を変えながら計算します。

注意点：

- ターゲットとなる物質の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- 相互作用の計算方法、力場の種類、スーパーセルのサイズ、昇温速度も結果に影響を与えます。
- フィッティングは各種のグラフソフトや解析ソフトで実施することをお勧めします。

# 動作環境設定

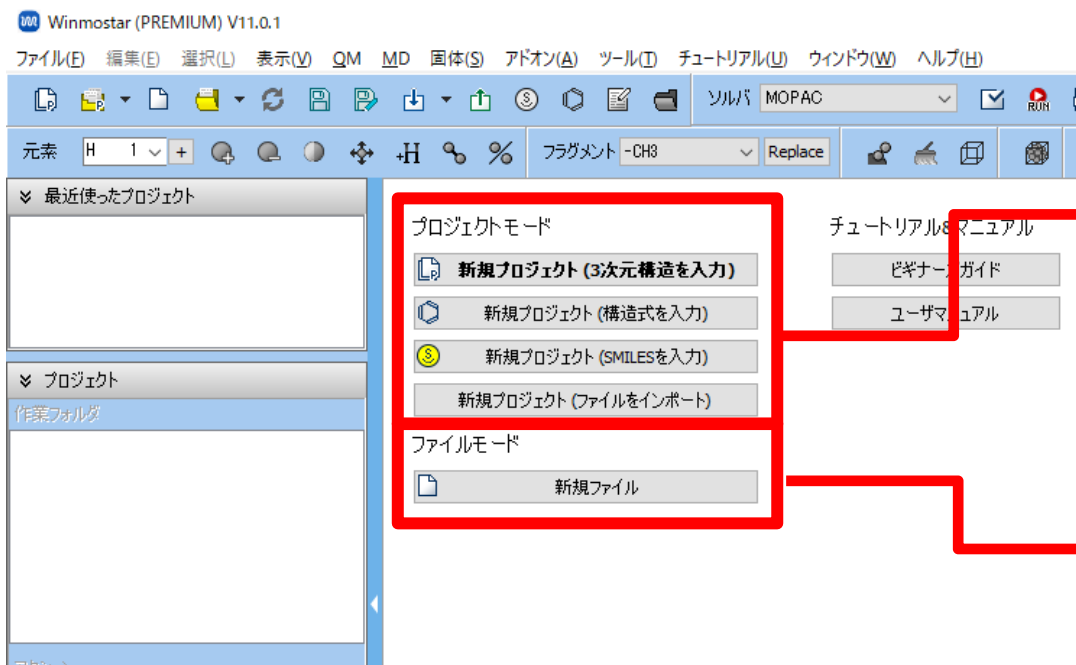
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のLAMMPSを利用したい方は、別途[Windows版LAMMPSのインストールと環境設定](#)が必要です。

# Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**と**ファイルモード**の2つの動作モードが用意されています。

本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。

ファイルモードの操作方法は[V10のチュートリアル](#)を参照してください。



## プロジェクトモード **V11新機能**

ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。  
基本的にこのモードを推奨します。

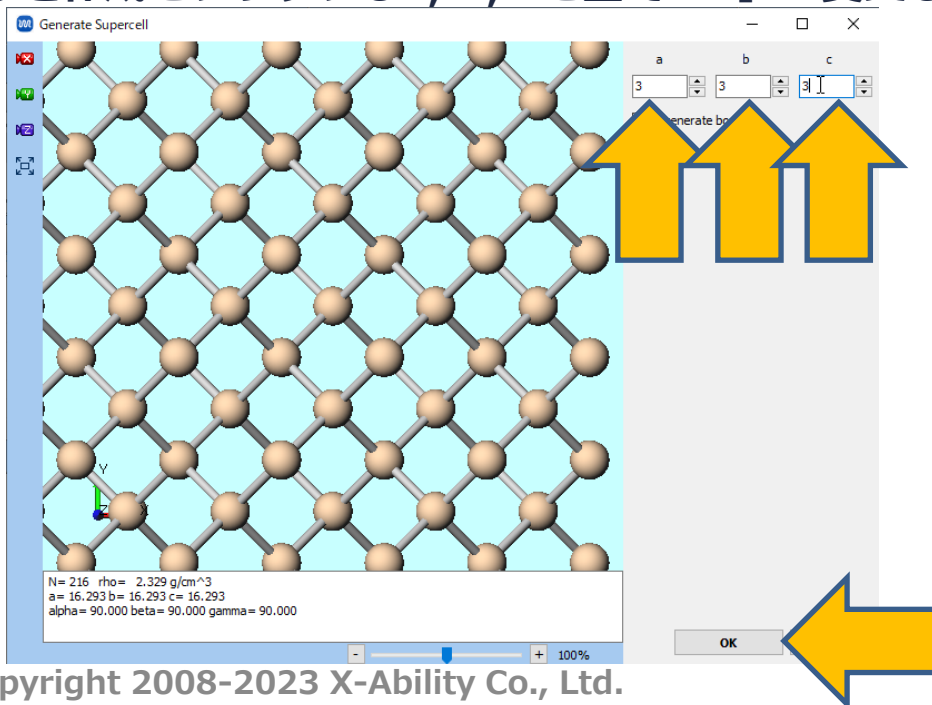
## ファイルモード

ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

# I. 系のモデリング

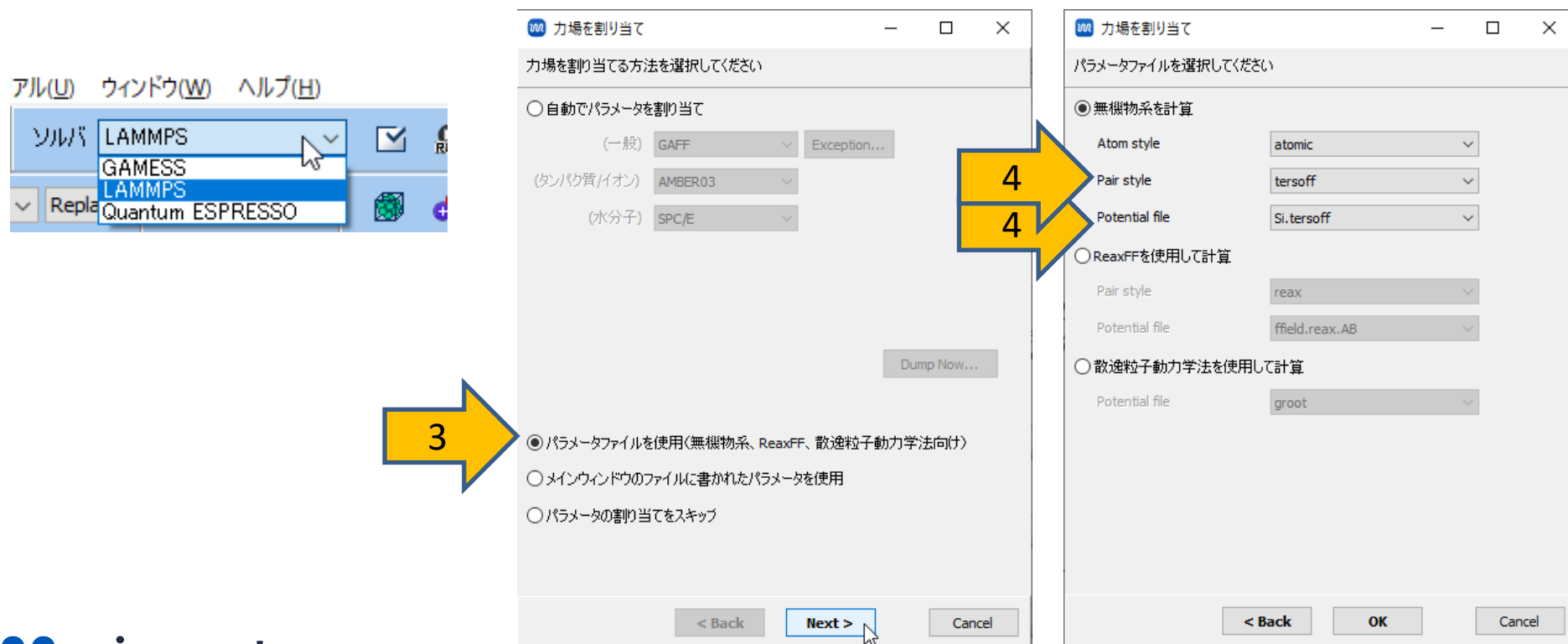
基本的な操作方は[LAMMPS基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

1. **ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、**プロジェクト名**に「si\_exp」と入力して**保存**をクリックします。
2. **ファイル | インポート | Samplesファイル | si.cif**をクリックします。
  - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。
3. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。
4. **固体 | スーパーセルを作成**をクリックしa, b, cを全て「3」に変更し**OK**をクリックします。



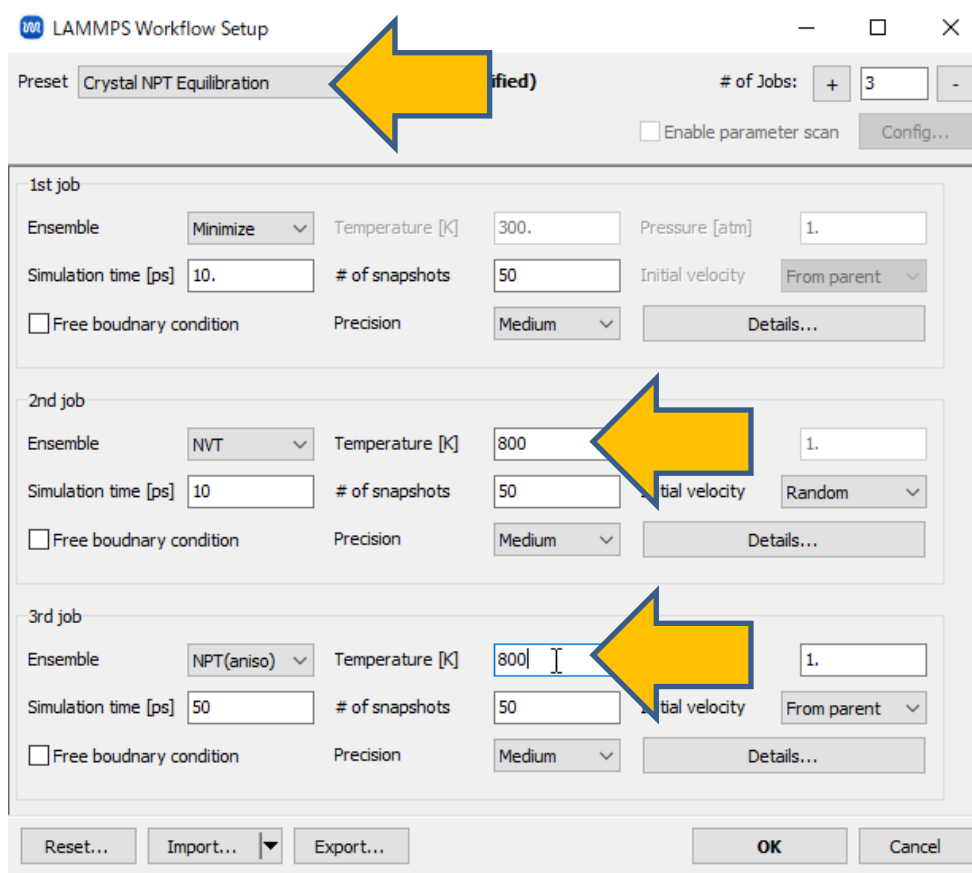
## II. 計算の実行（平衡化）

1. ソルバから**LAMMPS**を選択し、☒ (ワークフロー設定)を開きます。
2. 「電荷が設定されていない分子が含まれます...」と表示されたら**いいえ**をクリックします。
3. **パラメータファイルを使用（無機物系...）**に選択して**Next**をクリックします。
4. **Pair Style**を「tersoff」、**Potential File**を「Si.tersoff」に変更します。
5. **OK**をクリックし、「力場が設定されました」と表示されたら**OK**をクリックします。



## II. 計算の実行（平衡化）

1. **Preset**を「Crystal NPT Equilibration」に変更し、**1st job**、**2nd job**の**Temperature**を「800」に変更します。
2. **OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。

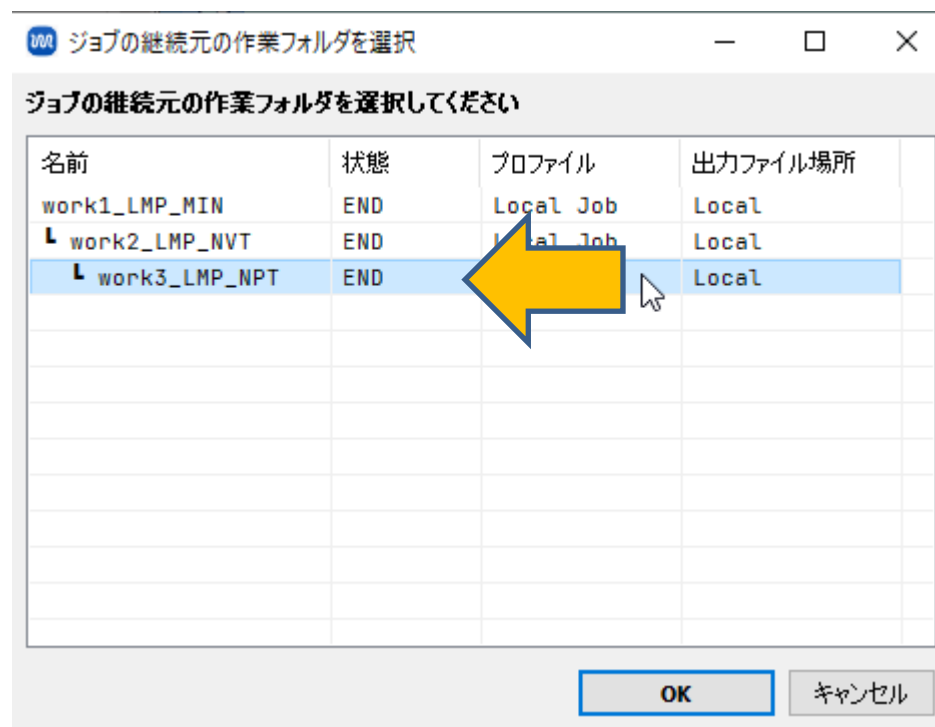
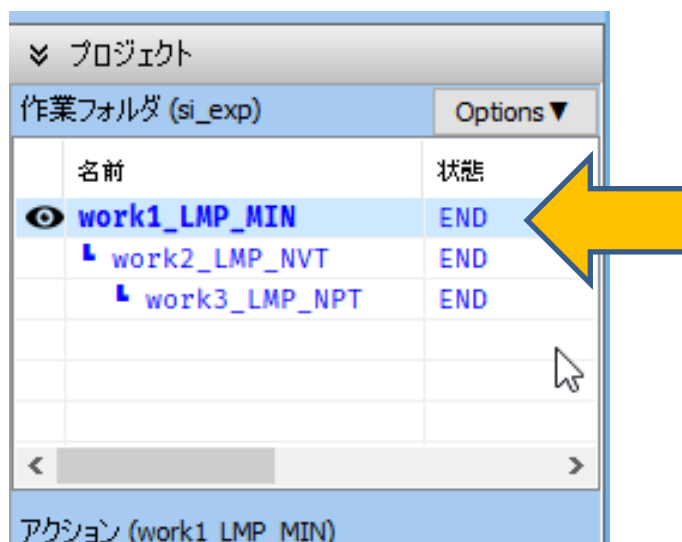


The screenshot shows the 'LAMMPS Workflow Setup' window. The 'Preset' dropdown is set to 'Crystal NPT Equilibration', indicated by a yellow arrow. The '# of Jobs' is set to 3. The '1st job' section has 'Ensemble' set to 'Minimize' and 'Temperature [K]' set to 300. The '2nd job' section has 'Ensemble' set to 'NVT' and 'Temperature [K]' set to 800, with a yellow arrow pointing to the temperature field. The '3rd job' section has 'Ensemble' set to 'NPT(aniso)' and 'Temperature [K]' set to 800, also with a yellow arrow pointing to the temperature field. The 'Simulation time [ps]' is 10 for the 1st and 2nd jobs, and 50 for the 3rd job. The '# of snapshots' is 50 for all jobs. The 'Initial velocity' is 'From parent' for the 1st and 3rd jobs, and 'Random' for the 2nd job. The 'Precision' is set to 'Medium' for all jobs. The 'Free boundary condition' checkbox is unchecked for all jobs. The 'Details...' button is available for each job. At the bottom, there are buttons for 'Reset...', 'Import...', 'Export...', 'OK', and 'Cancel'.



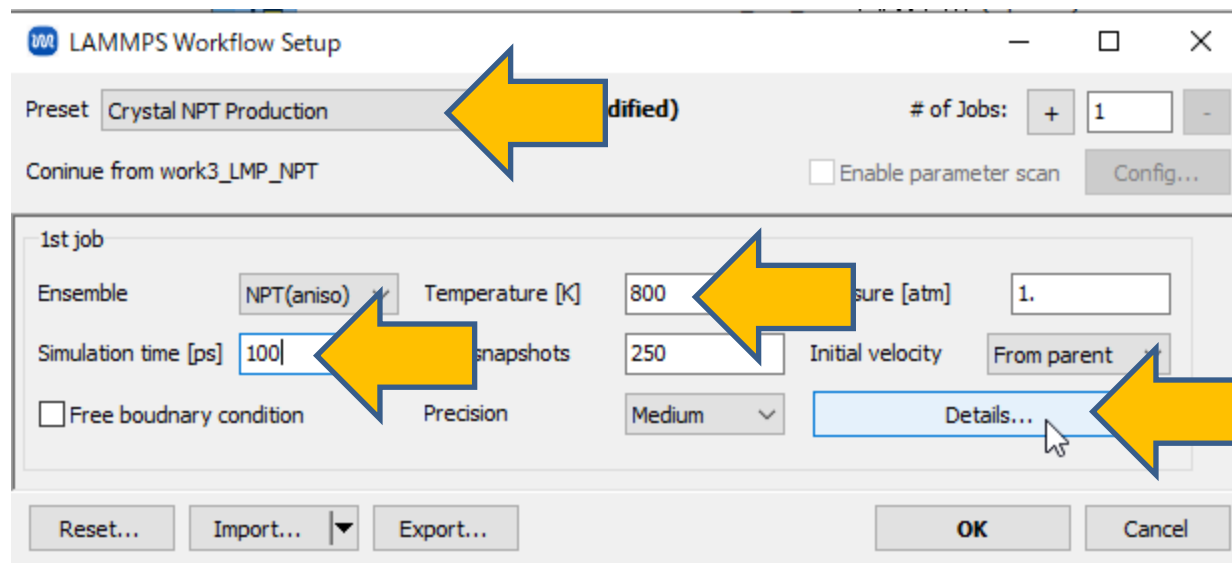
# III.計算の実行（本計算）

1. work1\_LMP\_MINからwork3\_LMP\_NPTまでの3つの作業フォルダの状態が**END**または**END(-)**に変化したら、☒（ワークフロー設定）をクリックします。
2. 「継続ジョブを実行しますか？…」と表示されたら**はい**をクリックします。
3. work3\_LMP\_NPTを選択し**OK**をクリックします。



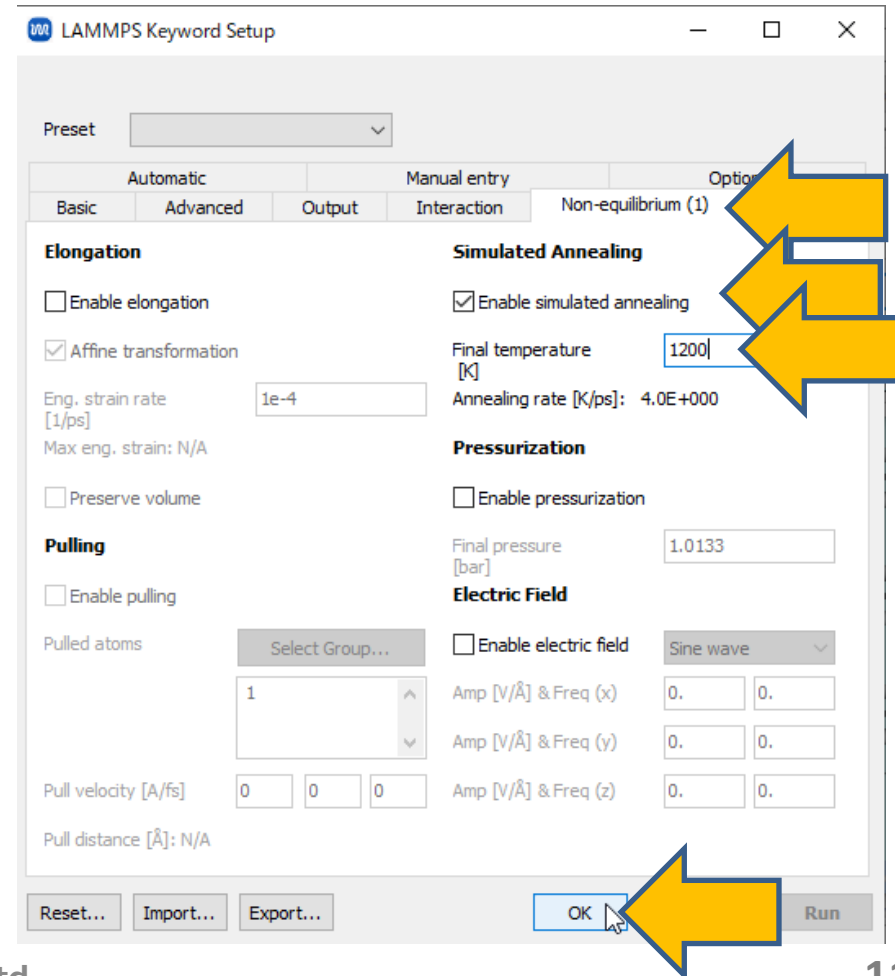
# III.計算の実行（本計算）

1. **Preset**を「Crystal NPT Production」に変更します。
2. 以下のように設定を変更します。
  1. **1st job**の**Temperature**を「800」に変更
  2. **1st job**の**Simulation time**を「100」に変更
3. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job**の**Precision**を「Low」、**Simulation time**を「50」に変更します。
4. **Details...**をクリックします。



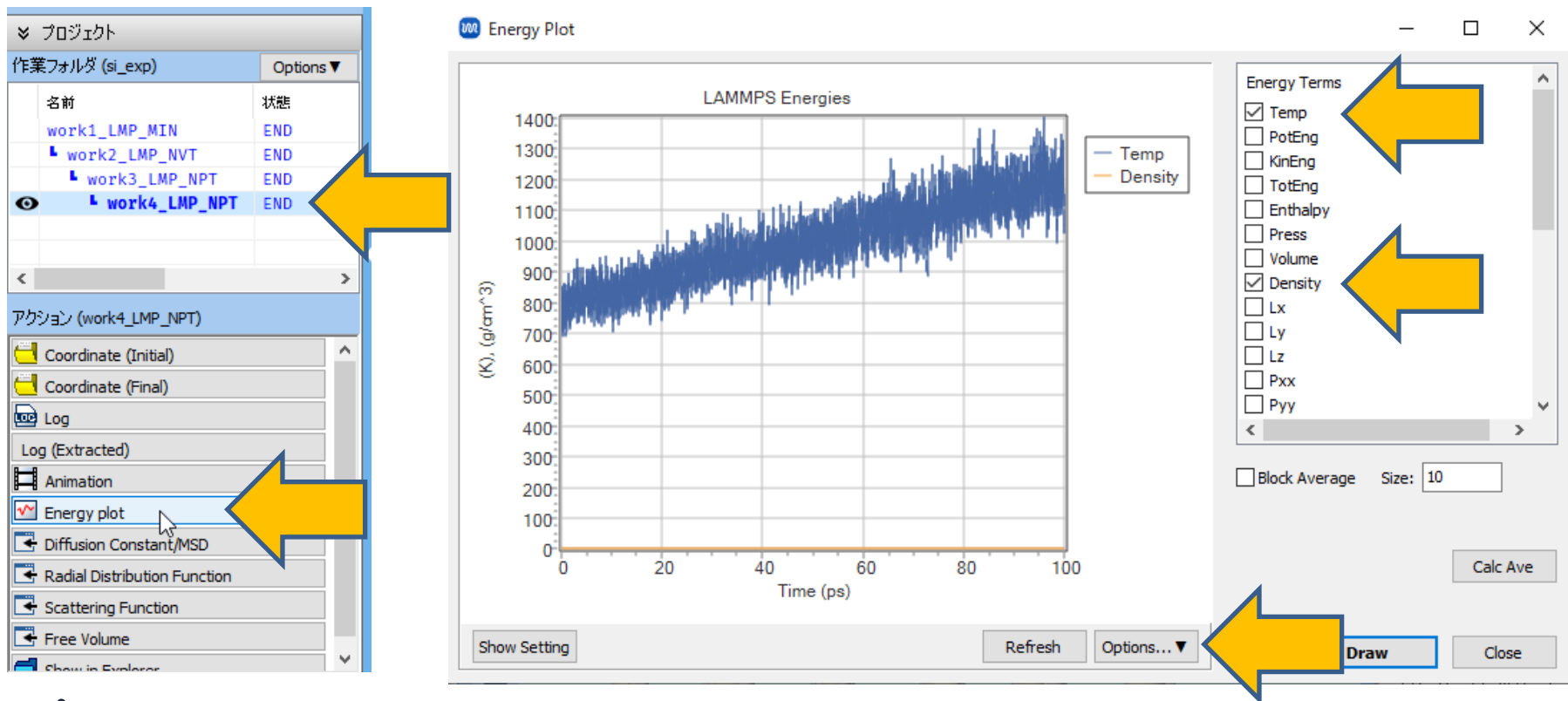
# III.計算の実行（本計算）

1. LAMMPS Keyword Setupウィンドウで**Non-equilibrium(1)**タブに移動し以下のように設定を変更します。
  1. **Enable simulated annealing**をチェック
  2. **Final temperature**を「1200」に変更
2. **OK**をクリックして**LAMMPS Keyword Setup**ウィンドウを閉じます。
3. **LAMMPS Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックします。
4. **ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定を変更し実行をクリックします。



## IV. 結果解析

1. work4\_LMP\_NPTの作業フォルダの状態が**END**または**END(-)**に変化したら、「work4\_LMP\_NPT」をクリックし、**アクション**で  **Energy plot**をクリックします。
2. **Energy Terms**にて**Temp**と**Density**にチェックを入れ**Draw**をクリックし、**Options Export csv & Open Excel**をクリックします。
3. 名前を付けて保存で保存をクリックします。

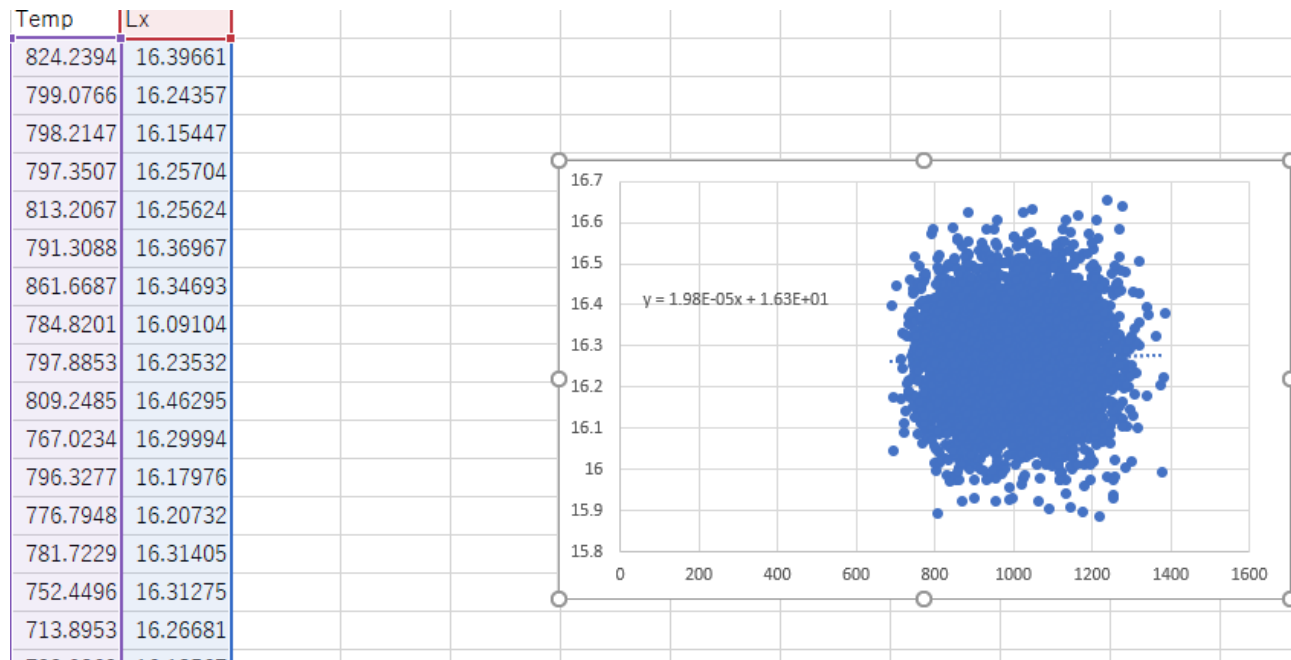


## IV. 結果解析

生成されるcsvファイルの2カラム目（温度）、3カラム目（X方向のシステムサイズ）を一次関数 $y=a*x+b$ でフィッティングします。

膨張係数は、 $a/(a*1000+b)$ です。

下の例では $1.98e-5 / (1.98e-5 * 1000 + 16.3) = 1.2e-6 \text{ K}^{-1}$ となります。



# 最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



## [ユーザマニュアル](#)



## [Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar導入講習会](#)、[Winmostar基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上