#### **M** winmostar チュートリアル

# LAMMPS 融点計算

V11.1.2

2022年5月10日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
  - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



 Si結晶の1 atmにおける融点を、固液界面系のNPH一定計算から算出します。この方法では、 NPH一定計算の最終温度と平衡化時の温度が一致する場合、その温度を融点とみなせます。
 S. Yoo, X. C. Zeng and J. R. Morris, J. Chem. Phys., 120, 3, (2004), 1654-1656.



#### 注意点:

- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は本例とは異なる場合はあります。
- 相互作用計算方法や力場も計算結果に大きく影響します。
- システムサイズ(固相のリピート数)、初期温度、接触面の違いも結果に影響を与えます。
- 本書の計算では最終温度(2500 K付近)と平衡化時の温度(2300 K)が異なるため、本来なら最終温度を用いて再び全ての手順を繰り返す必要があります。



- 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<u>推奨バージョン</u>以外のLAMMPSを利用したい方は、別途 <u>Windows版LAMMPSのインストールと環境設定</u>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<u>V10のチュートリアル</u>を参照してください。

#### Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



#### I. 系のモデリング(固相)

基本的な操作方法は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\_sle」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(固相)

- 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「SiC\_1989.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。

アル(U) ウィンドウ(W) ヘルブ(H)       力場を割り当てる方法を選択してください       パラメータファイルを選択してください         ソルバ LAMMPS       (一般) GAFF       Exception       4         (小般) GAFF       (一般) GAFF       Exception       4         (少パり質バオン) AMBER03       (小化) で       4       etomic	×
アルバ LAMMPS CAMESS LAMMPS CAMESS CA	
ソルド LAMMPS GAMESS GAMESS (一般) GAFF Exception  GAMESS (少パウ質パオン) AMBER03  V Repla Output up ESPRESSO	
GAMESS (多次的資格力) AMBER03 4 Pair style tersoff v	
(WG+) SPC/E Potential file SiC_1989, tersoff V	
○ ReaxFFを使用して計算	
Pair style reax ~	
Potential file ffield.reax.AB $\checkmark$	
Dump Now  〇 散逸粒子動力学法を使用して計算	
Potential file	
3 ● パラメータファイルを使用〈無機物系、ReaxFF、 散逸粒子動力学法向け〉	
○メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用	
○パラメータの割り当てをスキッブ	
<pre></pre>	

#### II.計算の実行(固相)

- 1. Presetを「Crystal NPT Equilibration」に変更し、 2nd job、3rd jobのTemperatureを 「2300」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。

LAMMPS Workflow Setup			– 🗆 X		
Preset Crystal NPT Equilibration	# of Jobs: + 3 -				
			Enable parameter scan Config		
1st job					
Ensemble Minimize $\vee$	Temperature [K]	300.	Pressure [atm] 1.		
Simulation time [ps] 10.	# of snapshots	50	Initial velocity $\qquad$ From parent $\qquad$		
Free boudnary condition	Precision	Medium $\checkmark$	Details		
2nd job					
Ensemble NVT $\sim$	Temperature [K]	2300	1.		
Simulation time [ps] 10	# of snapshots	50	Init velocity Random 🗸		
Free boudnary condition	Medium $\checkmark$	Details			
3rd job					
Ensemble NPT(aniso) $\vee$	Temperature [K]	2300	1.		
Simulation time [ps] 50	# of snapshots	50	Initi velocity From parent 🗸		
Free boudnary condition	Precision	Medium $\sim$	Details		
Reset Import 🔽 i	Export		OK Cancel		

## III.ポスト処理(固相)

- 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、作業フォルダで「work3\_LMP\_NPT」をクリックしアクションで Coordinate(Final)をクリックします。
- 2. **(ファイルをエクスポート)**をクリックし、1階層上のsi\_sle.wmpjdataフォルダの下 に「si\_solid.cif」というファイル名で保存します。



#### IV.計算の実行(液相)

∭ ジョブの継続元の作業フォルダを選択

- 1. 再び M (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。

- 🗆 X

- 3. work3\_LMP\_NPTを選択し**OK**をクリックします。
- 4. Preset を「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production」に変更しTemperature を 「6000」に変更します。
- 5. 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。

ジョブの維続元の作業フォルタ	を選択してく	ださい		🚾 LAMMPS Workflow Setup - 🗆 🗙
名前 work1_LMP_MIN work2_LMP_NVT work3_LMP_NPT	状態 END END	プロファイル Local Job Local Job Local Job	出力ファイル場所 Local Local	Image: Control of the setup   Preset   Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production   (modified)   # of Jobs:   +   1   Coninue from work3_LMP_NPT   Ist job   Ensemble   NVT   Temperature [K]   6000   Fressure [atm]   1.   Simulation time [ps]   50   # of snapshots   250   Initial velocity   From parent   Free boudnary condition   Precision   Medium   Details   OK  Cancel
			<b>OK</b> キャンセル	

## V. ポスト処理(液相)

- 1. work4\_LMP\_NVTの**作業フォルダ**の**状態**が**END**または**END(-)**に変化したら、**作業フォルダ** で「work4\_LMP\_NVT」をクリックし**アクション**で**Coordinate(Final)**をクリックします。
- 2. **(ファイルをエクスポート)**をクリックし、1階層上のsi\_sle.wmpjdataフォルダの下 に「si\_liquid.cif」というファイル名で保存します。
- ※ シミュレーションセル外側に原子が表示される場合がありますが、WinmostarではCIF形式 で保存し読み込むとシミュレーションセルの内側に原子が再配置されるため問題ありません。



## VI. 系のモデリング(界面系)

- 1. MD | 界面ビルダをクリックします。
- 2. Cell 1の...ボタンをクリックし、P. 8でエクスポートしたsi solid.cifを選択します。
- 3. Cell 2の...ボタンをクリックし、P. 10でエクスポートしたsi liquid.cifを選択します。
- 4. DirectionタブのIntervalを「2」に変更し、Buildをクリックします。



#### VI. 系のモデリング(界面系)

- 1. 🛛 (X軸方向から表示)をクリックします。
- 2. 🔁 (**ウインドウサイズに合わせる**)をクリックする。



- 1. 再び M (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?…」と表示されたらいいえをクリックします。
- 3. 「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。
- 4. 「分子ごとに番号がソートされていません…」と表示されたらはいをクリックします。
- 5. 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。
- 6. Pair Styleを「tersoff」、Potential Fileを「SiC\_1989.tersoff」に変更します。
- 7. 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。
- 8. Presetを「Crystal NPT Equilibration」に変更し2nd jobと3rd jobのTemperatureを 「2300」に変更します。

Preset Crystal NPT Equilibration V (modified) # of Jobs: + 3 -							
				Enable param	eter scan Config		
1st job							
Ensemble	Minimize $\lor$	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		
Simulation time [ps]	10.	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent $\sim$		
Free boudnary c	ondition	Precision	Medium $\sim$	Details			
2nd job							
Ensemble	NVT $\sim$	Temperature [K]	2300.				
Simulation time [ps]	10	# of snapshots	50	In relocity	Random ~		
Free boudnary c	ondition	Precision	Medium $\sim$	Details			
3rd job							
Ensemble	NPT(aniso) 🗸	Temperature [K]	2300 T				
Simulation time [ps]	50	# of snapshots	50	In relocity	From parent 🗸		
_							

- **1. 3rd job**のDetailsをクリックし、Pressure controlを「z」に変更してOKをクリックしま 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。

M LAMMPS Workflow Set	up		- 0
Preset Crystal NPT Equilibrat	ion ~ (mo	odified)	# of Jobs: + 3
1st ish			
Ensemble Minimiz	Temperature [K]	300	Pressure [atm]
Simulation time [os] 10	# of spapshots	50	Initial velocity
	# Of Shapshots	Madium	Profiparent ~
Free boudnary condition	Precision	Medium V	Details
2nd job			
Ensemble NVT	✓ Temperature [K]	2300.	Pressure [atm]
Simulation time [ps] 10	# of snapshots	50	Initial velocity Random V
Free boudnary condition	Precision	Medium V	Details
3rd job			
Ensemble NPT(an	iso) 🗸 Temperature [K]	2300	Pressure [atm] 1.
Simulation time [ps] 50	# of snapshots	50	Initial velocity From parent
Free boudnary condition	Precision	Medium $\sim$	Details
Reset Import	Export		OK Can

- work5\_LMP\_MINからwork7\_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、再び ○(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. work7\_LMP\_NPTを選択しOKをクリックします。

🕺 ジョブの継続元の作業フォルダを選択

ジョブの維続元の作業フォルダを選択してください

- 🗆 🗙

名前	状態	プロファイル	出力ファイル場所
work1_LMP_MIN	END	Local Job	Local
work2_LMP_NVT	END	Local Job	Local
■ work3_LMP_NPT	END	Local Job	Local
work4_LMP_NVT	END	Local Job	Local
work5_LMP_MIN	END	Local Job	Local
work6_LMP_NVT	END	Local Job	Local
■ work7_LMP_NPT	END	Local Job	Local
	6		
			**************************************
		0	***>U//

- 1. Presetを「Crystal NPT Production」に変更しEnsembleを「NPH」に変更します。
- 2. Detailsをクリックし、Pressure controlを「z」に変更してOKをクリックします。
- 3. 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。

🚾 LAMMPS Workflow Setup		—		×			
Preset Crystal NPT Production V (modified) # of Jobs: + 1							
Coninue from work7_LMP_NPT	Enable parameter scan Config						
1st job							
Ensemble NPH	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		]	
Simulation time [ps] 50	# of snapshots	250	Initial velocity	From par	rent 🗸		
Free boudnary condition	Medium $\sim$	De	tails				
Reset Import 🔻 Export OK Cancel							

#### VIII. 結果解析

- work8\_LMP\_NPHの作業フォルダの状態がENDまたはEND(-)に変化したら、作業フォルダで 「work8\_LMP\_NPH」をクリックしアクションで M Energy Plotをクリックします。
- 2. Tempにチェックを入れ、Drawボタンを押すと温度変化が表示されます。
- 3. 特定時間範囲の平均温度を取得したい場合はグラフ下の**Options** | **Calculate Average**を使用 します。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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<u>よくある質問</u>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、<u>お問合せフォーム</u>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