M winmostar チュートリアル

LAMMPS 膨張係数計算

V10.4.3

2021年4月1日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.



- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方はビギナーズガイド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。

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。
- 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

- 本機能を用いるためには、LAMMPSとCygwinのセットアップが必要です。
- <u>https://winmostar.com/jp/installation/</u>インストール方法のWindows用のLAMMPSと Cygwinの設定手順に従います。

(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境(cygwin_wmと呼びま す)を構築します。

<u>ビルド済みのcygwin wmをインストールする場合(推奨)</u> cygwin wmをビルドする場合(非推奨、上級者向け) Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合(ベータ版)

(7) WinmostarをインストールしたWindows PC (ローカルマシン)上で使用するソルバを、 以下のリンク先の手順でインストールします。

<u>GAMESS</u><u>NWChem</u><u>LAMMPS</u><u>NAMD</u><u>Quantum ESPRESSO</u><u>FDMNES</u> ※Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするcygwin_wmに含まれます。

I. 固相の作成

本チュートリアルでは、シリコンの融点を計算する。

- 1. **ファイル | 開く**をクリックする。
- 2. サンプルフォルダ内の**si.cif**を開く。(デフォルトではC:¥winmos10¥Samples¥si.cif)

あるいは以下の設定を用いて結晶ビルダ上でSi結晶を作成する。

Crystal system : Cubic Space group : Fd-3m (227) Lattice constants : a=5.4309 Å Asymmetric unit : Si (0.0 0.0 0.0)



I. 固相の作成

- 1. **固体 | スーパーセル**を作成をクリックする。
- 2. 3 x 3 x 3のセルを作成する。
- 3. OKをクリックする。



II. 系の平衡化

- 1. ソルバー覧からLAMMPSを選択し、 M (キーワード設定)をクリックする。
- 2. 警告が出るが、いいえをクリックする。
- 3. パラメータファイルを使用を選択しNextをクリックする。
- 4. Pair Styleをtersoff、Potential FileをSi.tersoffに設定し、OKをクリックする。

	ご 力場を割り当て ー ロ ×	🚾 力場を割り当て	- 🗆 X	
	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	ю.	
	○自動でパラメータを書り当て	● 無機物系を計算		
	(一般) GAFF · Exception	Atom style	atomic 🗸	
答告 ×	(タンパク質/イオン) AMBER03 ~	Pair style	tersoff V	
▲ 電荷が設定されていない分子が含まれます。電荷を設定します	(水分子) SPC/E ~	Potential file	Si.tersoff	
<u>·</u> b?		○ReaxFFを使用して計算	N I	
(オレハマ) エハハラ(ハト) キャン/セル		Pair style	reax 🗸	
		Potential file	ffield.reax.AB \lor	
	Dump Now	○ 散逸粒子動力学法を使用し	○ 散逸粒子動力学法を使用して計算	
		Potential file	groot \lor	
	● ペ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			
	< Back Next > Cancel	<	Back OK Cancel	

II. 系の平衡化

- 1. Reset...ボタンをクリックし、警告ダイアログではいをクリックする。
- 2. PresetにてNPT (fast)を選択する。
- 3. Generate initial velocityをチェック、Temperatureを800、 Pressure Controlをanisoにする。
- 3. Runをクリックし、ファイル名をsi333として保存する。

🚾 LAMMPS Setup				-		×
Extending Simulation			1	pro	cesses	
Preset NPT (fast)	\sim					
Automatic	~	Manual entry	anual entry Options		ions	
Basic Advanced	Output	Interaction	Non-equilib	rium (1)	Restra	int
Unit/Format/Potential Temperature Coupling						
Units	metal	 Temperatu 	ıre [K]	800	•	
Atom style	atomic	✓ Tdamp [ps]	0.1		
Pair style	tersoff	 Pressure 	Coupling			
Force field/Potential file	Si.tersoff	 Pressure c 	ontrol	aniso		~
Run Control		Pressure [bar]	1.013 1	.013 1.01	3
Time step [ps]	0.002	Pdamp [ps]	0.1		
# of time steps	5000					
Total time [ps]: 10						
Ensemble	npt	~				
Velocity Generation						
Generate initial velocity						
Random seed	12345					
Reset Load	Save Save as	s Default	ОК	Cancel	RUN R	un _L

III. 昇温計算

- └└(キーワード設定)をクリックする。 1.
- **Extending Simulation**にチェックを入れる。 2.
- 3. Basicタブにて、# of Time Stepsに50000と入力し、Generate initial velocityの チェックを外す。
- Non-equilibrium (1)タブにて、Enable Simulated Annealingにチェックを入れ、 4. Final Temperatureに1200と入力する。 Automatic Manual entry Options

Advance

Basic

Output

Interaction

Runをクリックする。 5.

			Elongation	Simulated Annealing
LAMMPS Setup		– 🗆 ×	Enable elongation	Enable simulated annealing
Extending Simulation Preset Minimize (fast) ~	MPI 1	processes	Affine transformation	ん Final temperature [120 [K]
Automatic	Manual entry	Options	Eng. strain rate	1e-4 Annealing rate [K/ps]: 4.0E+0
Advance Output	Interaction Non-equ	ilibrium (1) Restraint	Max eng. strain: N/A	
iit/Format/Potential	Temperature Coup Temperature [K]	800	Preserve volume	
m style atomic	∨ Tdamp [ps]	0.1	Pulling	
tyle tersoff	✓ Pressure Coupling		Enable pulling	
eld/Potential file Si.tersoff	 Pressure control 	aniso 🗸 🗸	Pulled atoms	Select Crown
ol	Pressure [bar]	1.013 1.013 1.013		Select Group
[ps] 0.002	Pdamp [ps]	0.1	1	
steps 50000				~
ne [ps]: 100			Pull velocity [A/fs] 0	0 0
e npt	\sim		Pull distance [Å] · N/A	
eneration			For orstance [A], N/A	
ate initial velocity			David Land	

winmostar Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

Non-equilibrium (1)

Cancel 🔐 Nun

Restraint

IV. 膨張係数の取得

- 1. [1] (エネルギー変化)をクリックする。
- 2. デフォルトで選ばれるファイルを開く。
- 3. Energy TermsのTempとLxにチェックを入れ、Drawをクリックする。
- 4. Options | Open Excelをクリックする。



IV. 膨張係数の取得

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でフィッティングする。1000Kのときの膨張係数は、 a/(a*1000+b)となる。下の例では1.98e-5 / (1.98e-5 *1000+16.3) = 1.2e-6 K⁻¹となる。





• 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、基礎編チュートリアルについては<u>Winmostar基礎講習会</u> へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては<u>個別講習会</u>のご依頼をご検討ください。
- 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