

 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

# 本書について

- 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[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。
- 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。
- フィットting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。
- <https://winmostar.com/jp/installation/> 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。

[ビルド済みのcygwin\\_wmをインストールする場合 \(推奨\)](#)

[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。

[GAMESS](#) [NWChem](#) [LAMMPS](#) [NAMD](#) [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

※ 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。

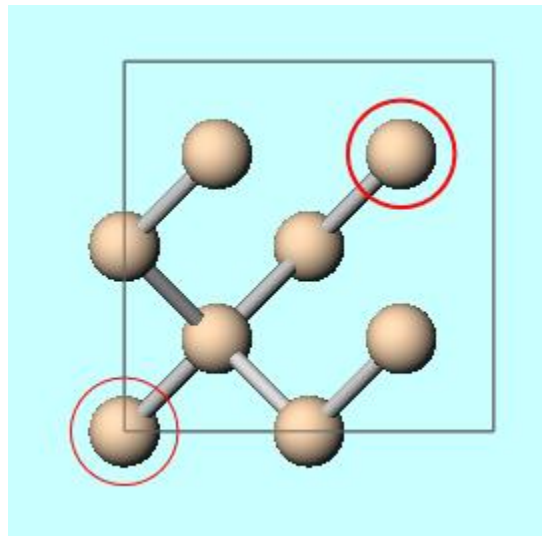
# I. 固相の作成

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)

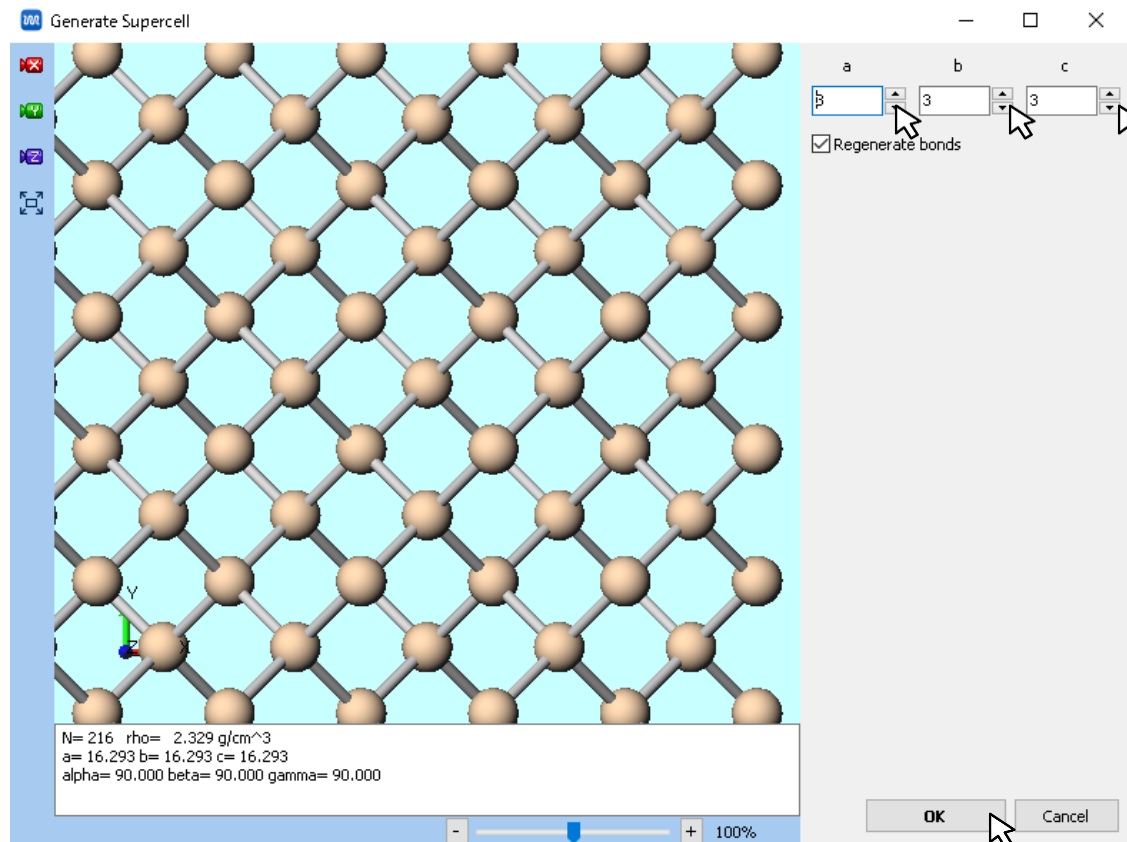
あるいは以下の設定を用いて結晶ビルダ上でSi結晶を作成する。

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



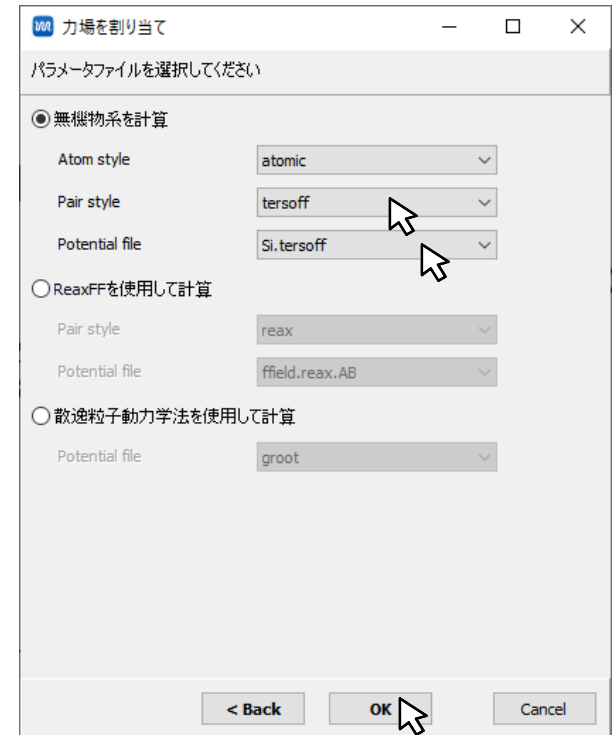
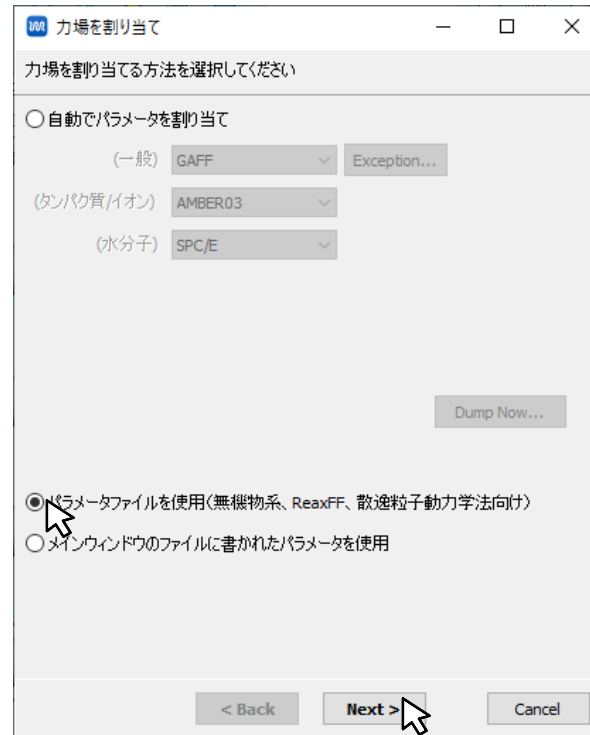
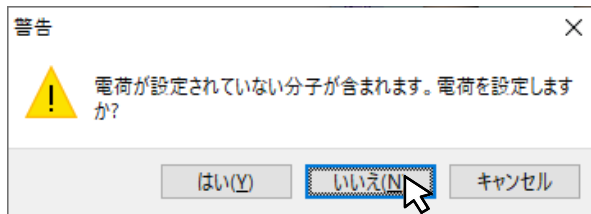
# I. 固相の作成

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



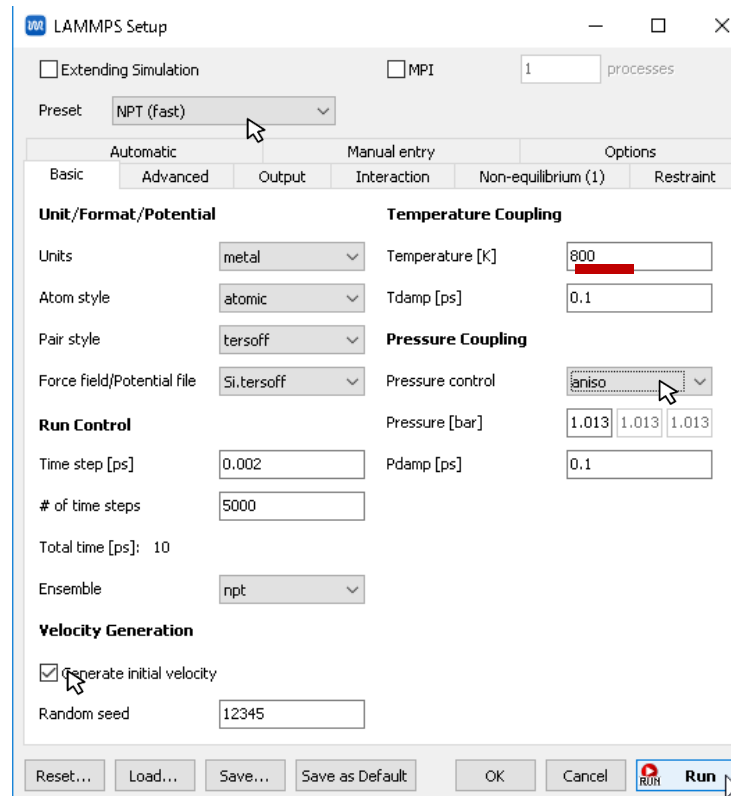
## II. 系の平衡化

1. ソルバー一覧から**LAMMPS**を選択し、 (**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。



## II. 系の平衡化

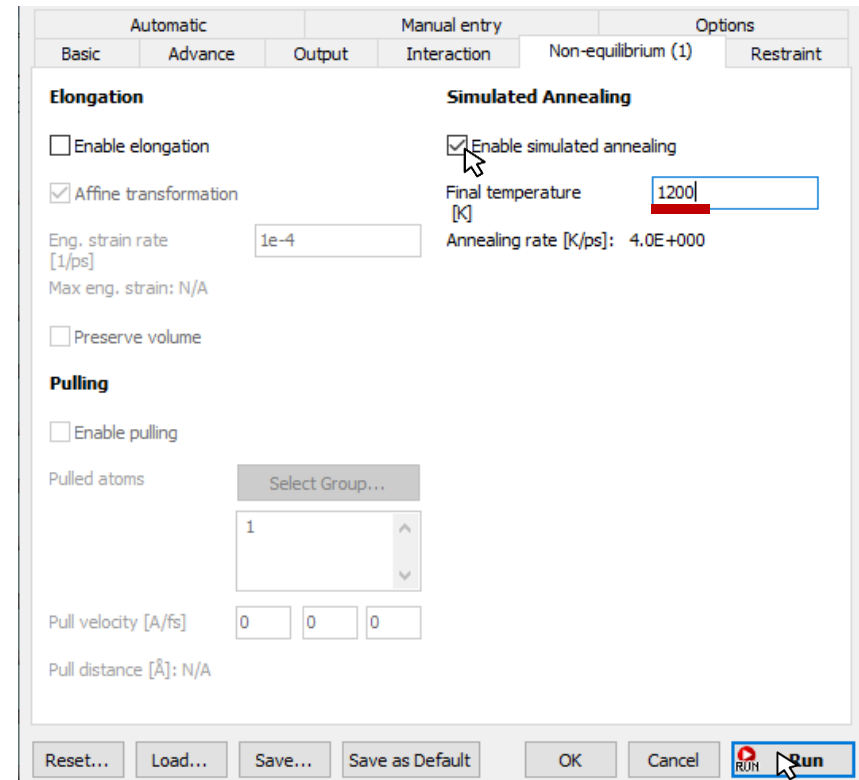
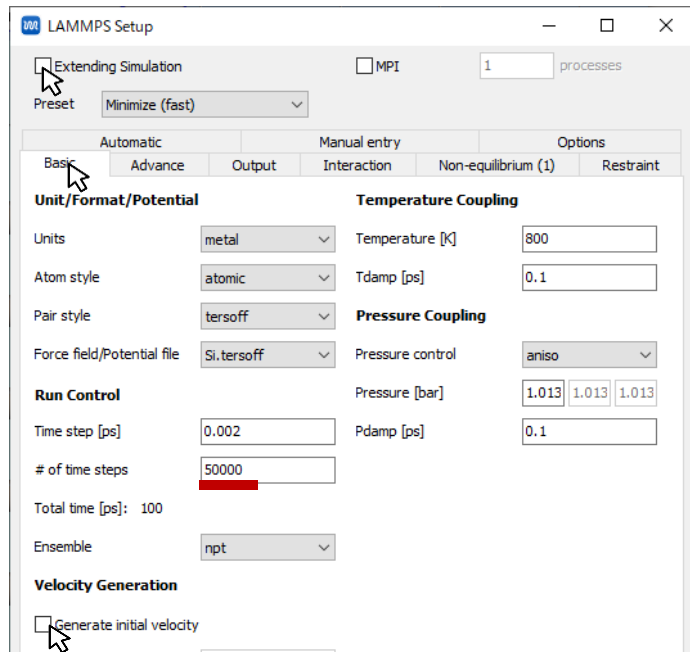
1. **Reset...** ボタンをクリックし、警告ダイアログで**はい**をクリックする。
2. **Preset**にて**NPT (fast)**を選択する。
3. **Generate initial velocity**をチェック、**Temperature**を**800**、**Pressure Control**を**aniso**にする。
3. **Run**をクリックし、ファイル名を**si333**として保存する。






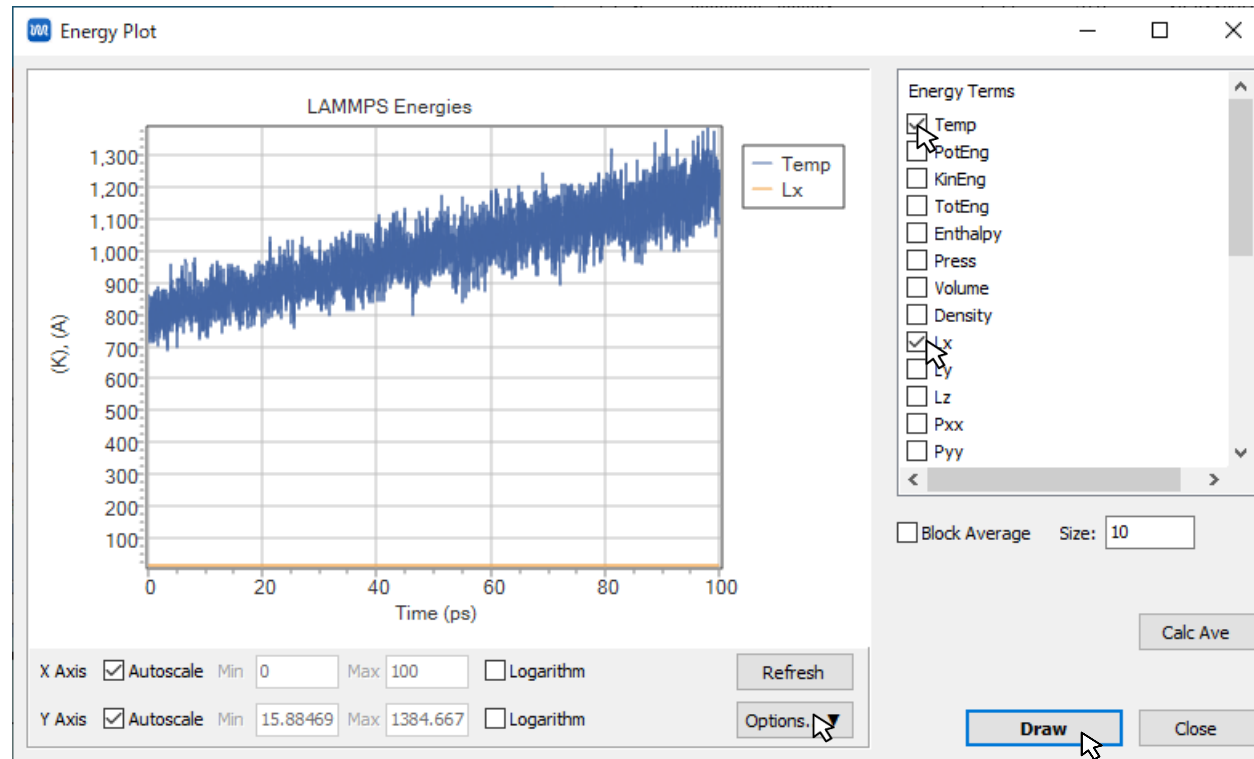
# III. 昇温計算

1.  (キーワード設定)をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れる。
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。
4. **Non-equilibrium (1)**タブにて、**Enable Simulated Annealing**にチェックを入れ、**Final Temperature**に**1200**と入力する。
5. **Run**をクリックする。



## IV. 膨張係数の取得

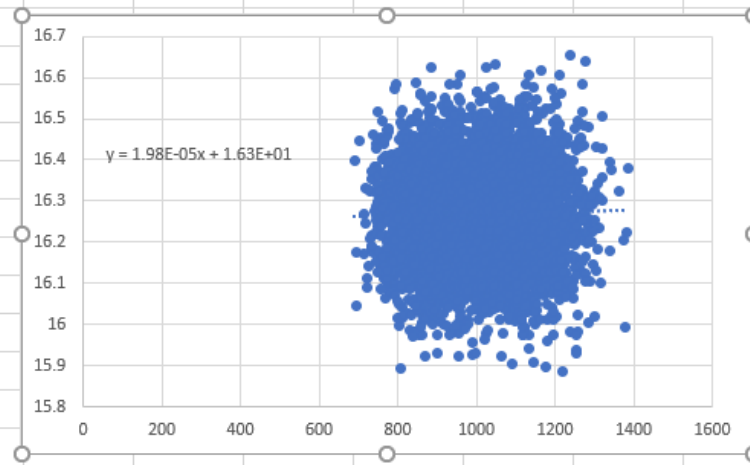
1.  (エネルギー変化)をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるファイルを開く。
3. **Energy Terms**の**Temp**と**Lx**にチェックを入れ、**Draw**をクリックする。
4. **Options | Open Excel**をクリックする。



## 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 $1.98e-5 / (1.98e-5 *1000+16.3) = 1.2e-6 \text{ K}^{-1}$ となる。

Temp	Lx
824.2394	16.39661
799.0766	16.24357
798.2147	16.15447
797.3507	16.25704
813.2067	16.25624
791.3088	16.36967
861.6687	16.34693
784.8201	16.09104
797.8853	16.23532
809.2485	16.46295
767.0234	16.29994
796.3277	16.17976
776.7948	16.20732
781.7229	16.31405
752.4496	16.31275
713.8953	16.26681



# 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、基礎編チュートリアルについては[Winmostar基礎講習会](#)へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては[個別講習会](#)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[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