

 winmostar チュートリアル

LAMMPS

伸長計算（固体）

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、AI結晶の伸長計算の手順を示します。
- 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、伸長速度も結果に影響を与えます。

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）](#)

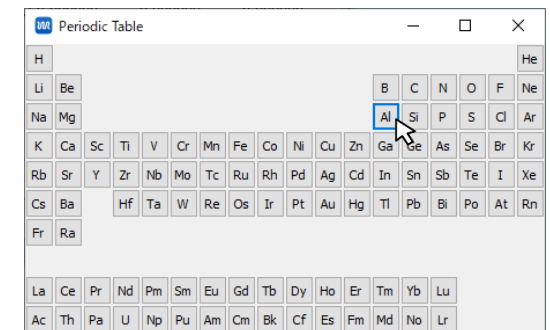
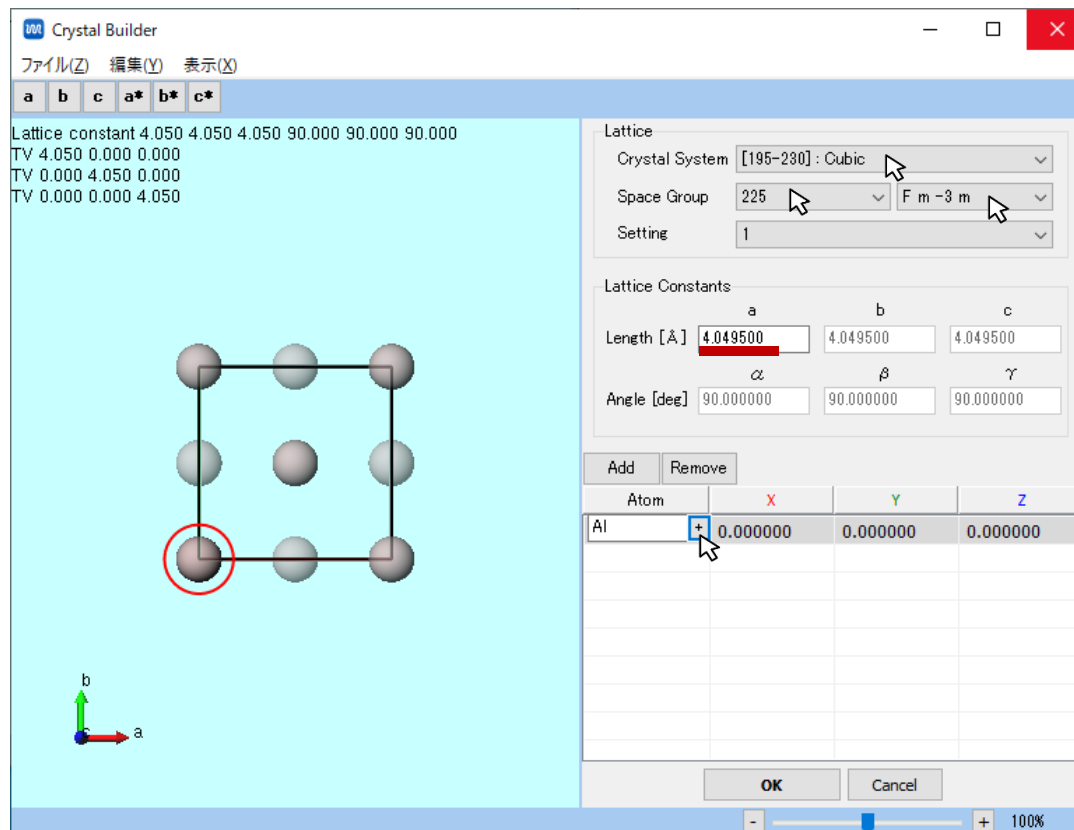
(7) WinmostarをインストールしたWindows PC（ローカルマシン）上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。

[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。

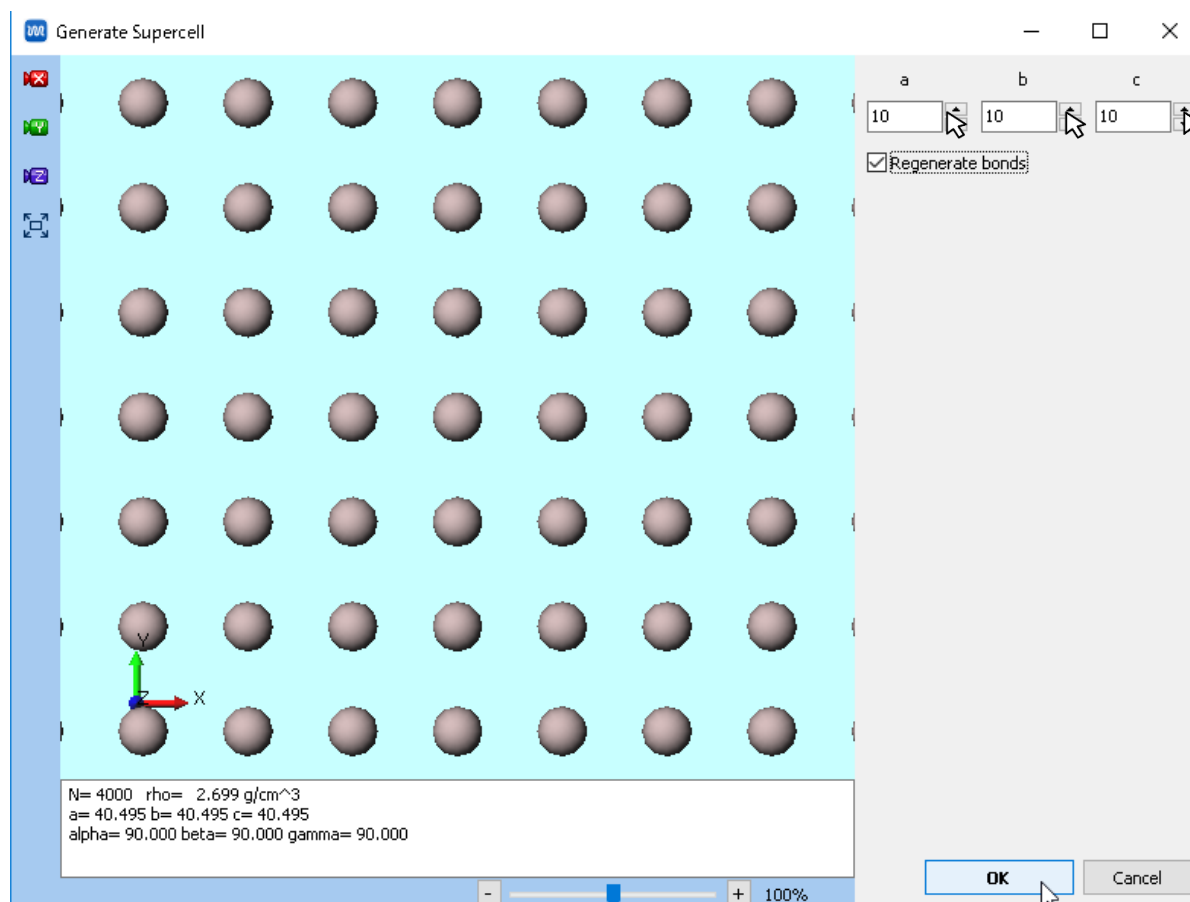
I. 系の作成

1. 固体 | 結晶ビルダをクリックする。
2. Cubic 225 Fm-3m、 $a=4.0495 \text{ \AA}$ 、 $(0.0, 0.0, 0.0)$ にAlが置かれた結晶を作成する。
3. OKをクリックする。



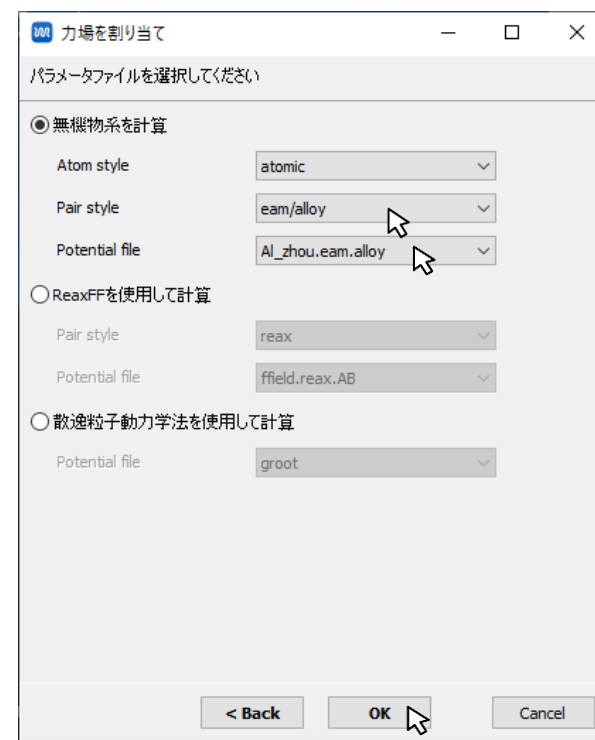
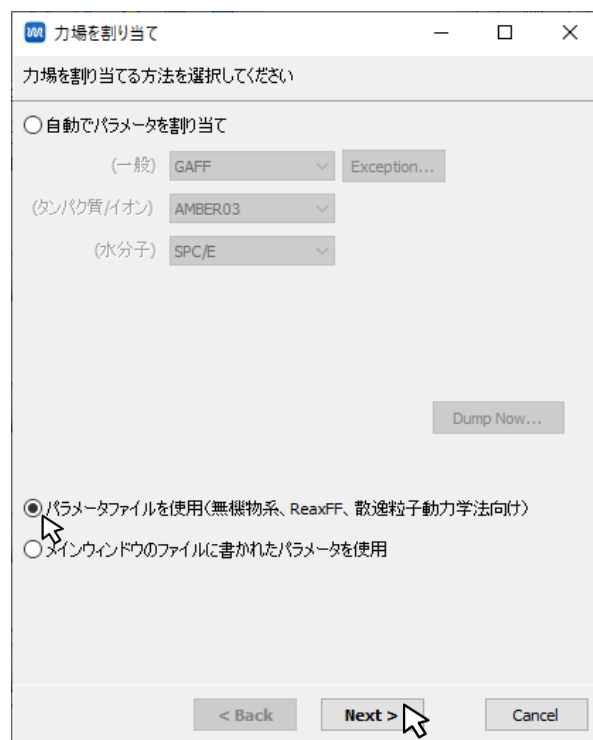
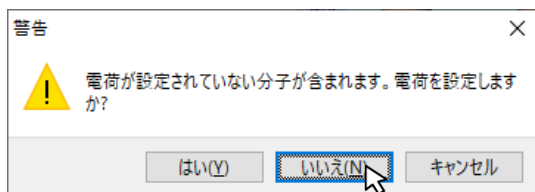
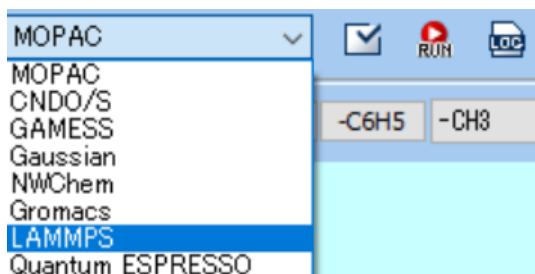
I. 系の作成

1. 固体 | スーパーセルを作成をクリックする。
2. $10 \times 10 \times 10$ のスーパーセルを作成し、OKをクリックする。



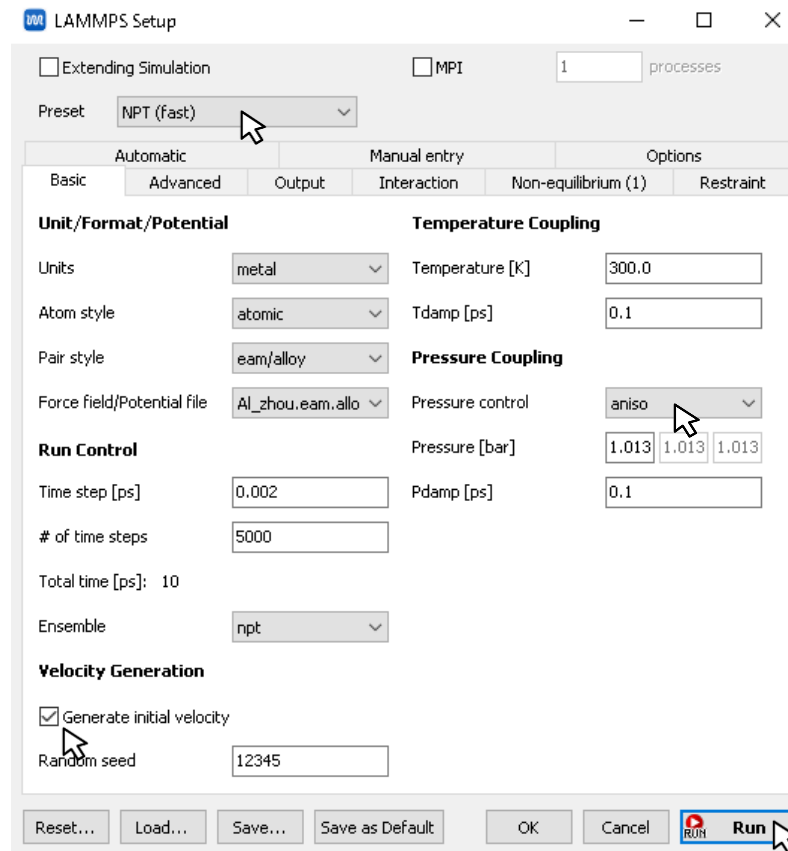
II. 系の平衡化

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eam/alloy、**Potential File**をAl_zhou.eam.alloyに設定し、**OK**をクリックする。



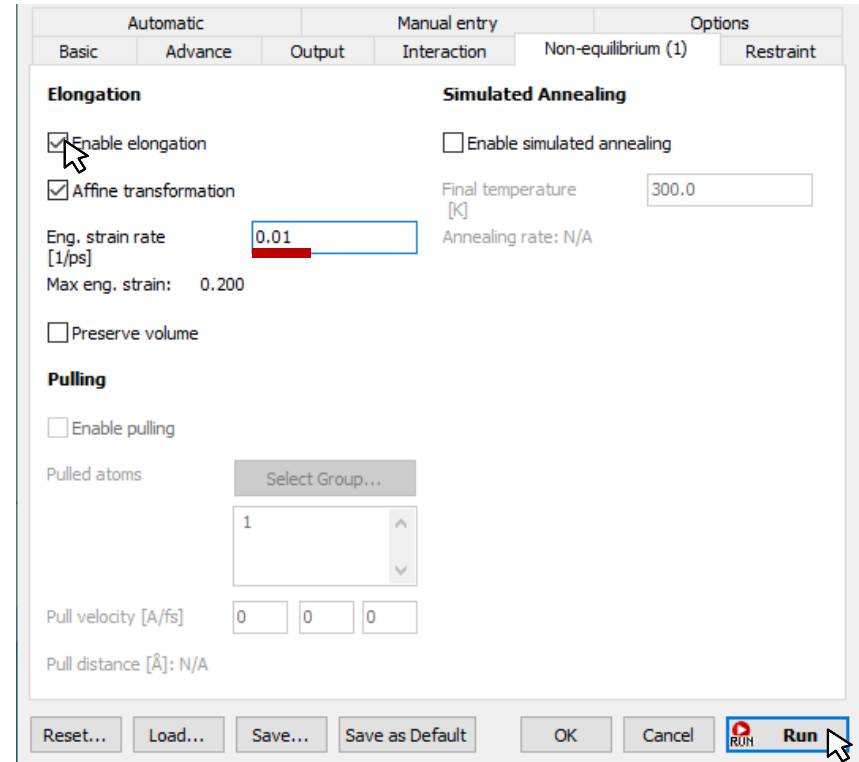
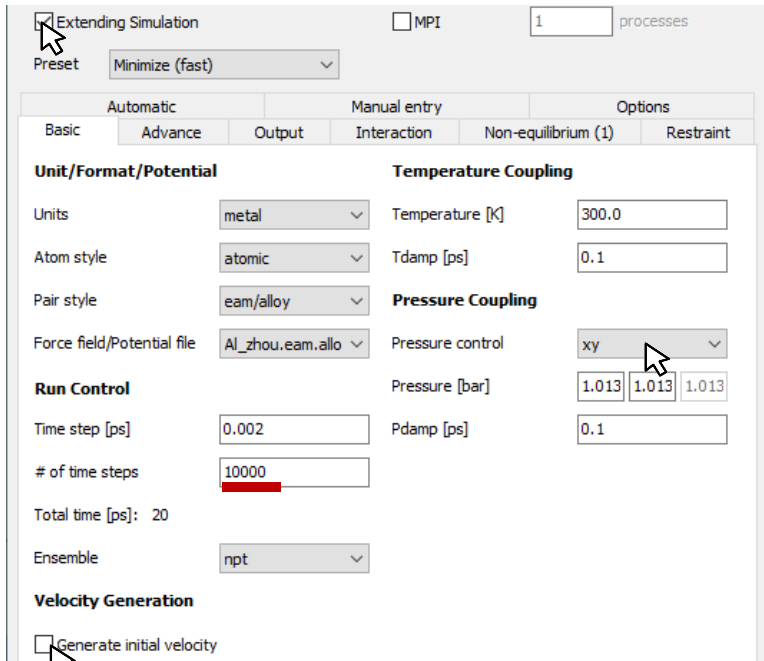
II. 系の平衡化

1. **Preset**をNPT(fast)に、**Pressure Control**を**aniso**に設定し、**Generate initial velocity**にチェックを入れる。
2. **Run**をクリックする。**ファイル名**を**al101010**として**保存**する。




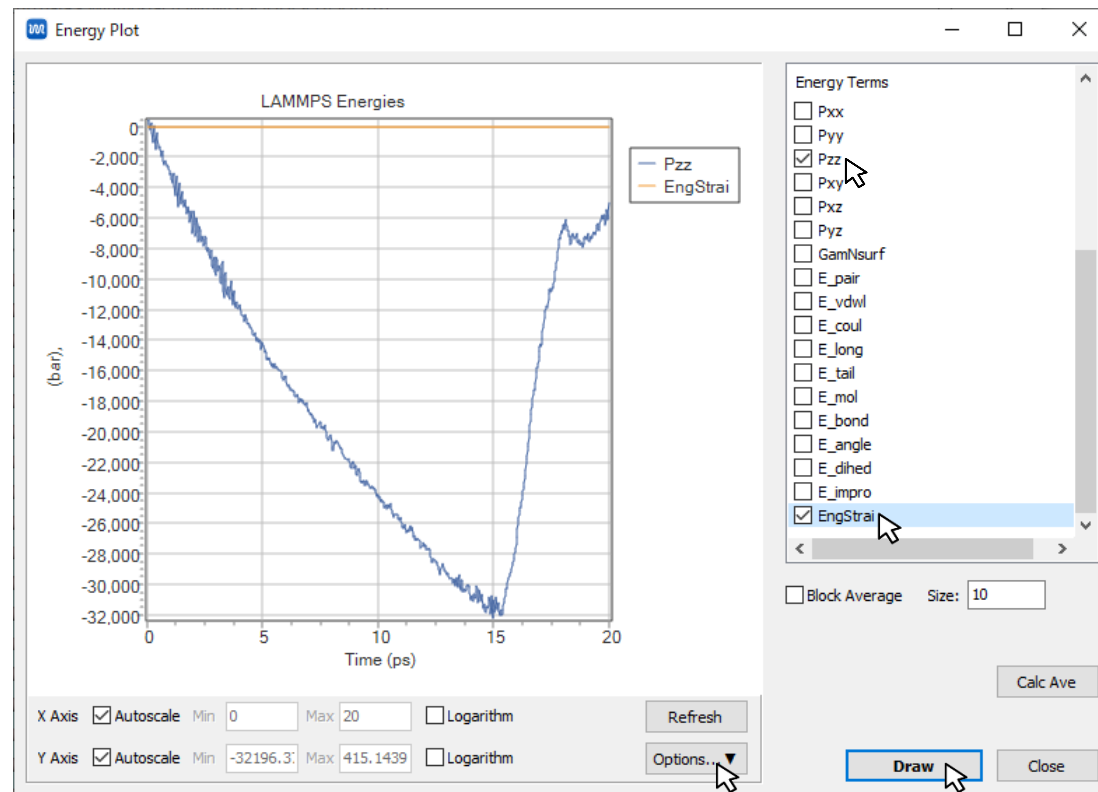
III. 伸長計算

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、**# of Time Steps**に**10000**、**Pressure Control**に**xy**を指定し、**Generate initial velocity**のチェックを外す。
3. **Non-equilibrium (1)タブ**で、**Enable elongation**にチェックを入れ、**Eng. Strain Rate**に**0.01**を入力する。
4. **Run**をクリックする。



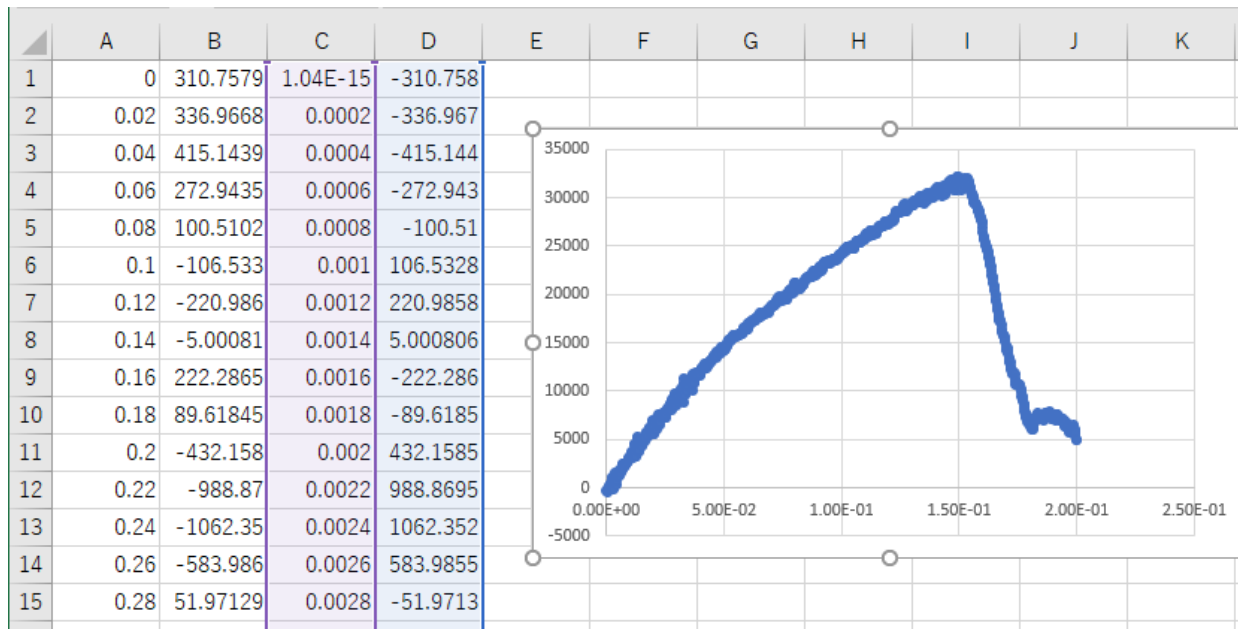
IV. 結果解析

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



IV. 結果解析

CSVを開き、x軸に3カラム目（工業ひずみ）、y軸（Pzz）に2カラム目に-1を掛けた数をプロットすると、S-S曲線が得られる。



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