

 winmostar チュートリアル

LAMMPS

融点計算

V10.4.3

2021年4月1日

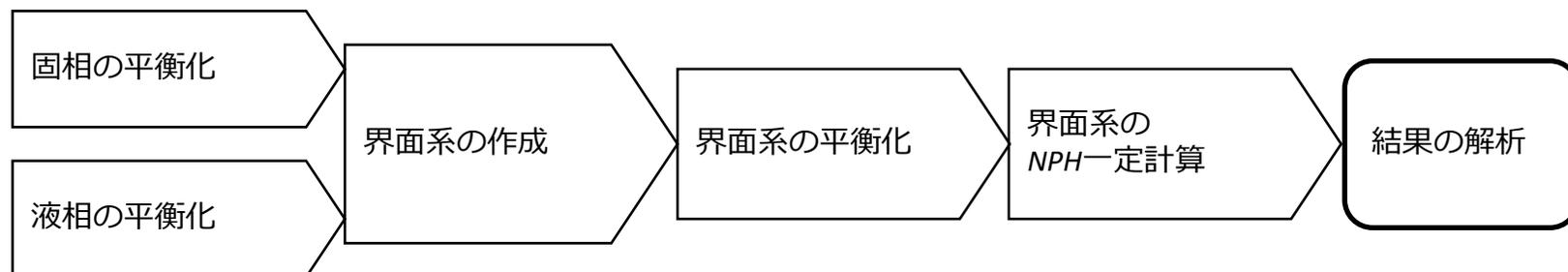
株式会社クロスアビリティ

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・注意点

- Si結晶の1 atmにおける融点を、固液界面系のNPH一定計算から算出する。



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があります。
- 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。

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。

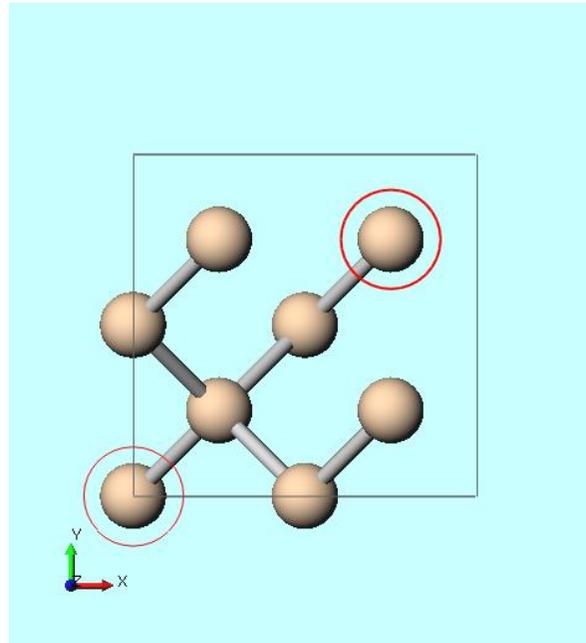
I. 固相の作成

本チュートリアルでは、シリコンの融点を計算する。

1.  (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:\winmos9\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。

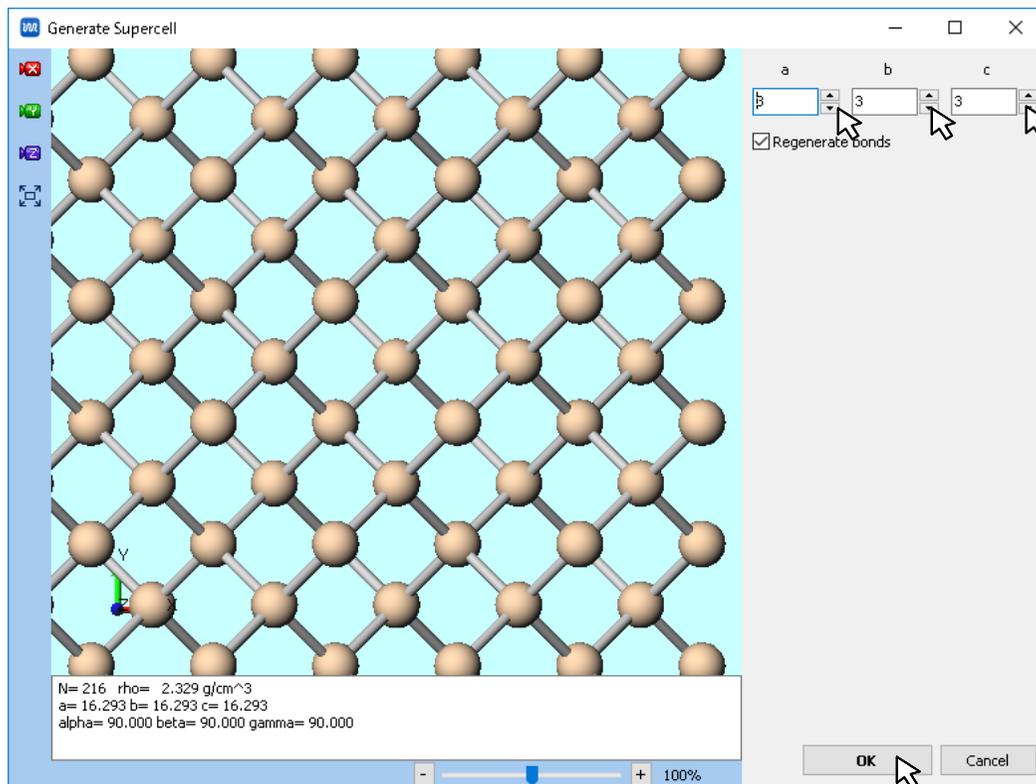
Crystal system : Cubic
Space group : Fd-3m (227)
Lattice constants : a=5.4309 Å
Asymmetric unit : Si (0.0 0.0 0.0)



I. 固相の作成

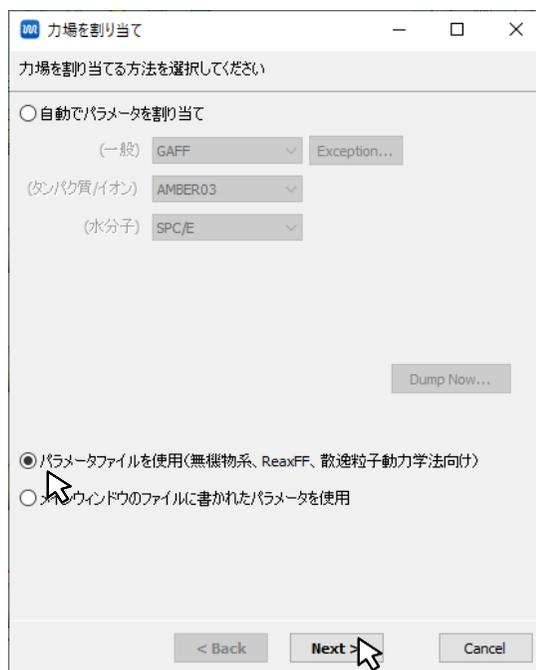
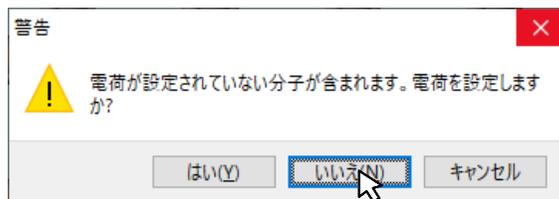
本チュートリアルでは、シリコンの融点を計算する。

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



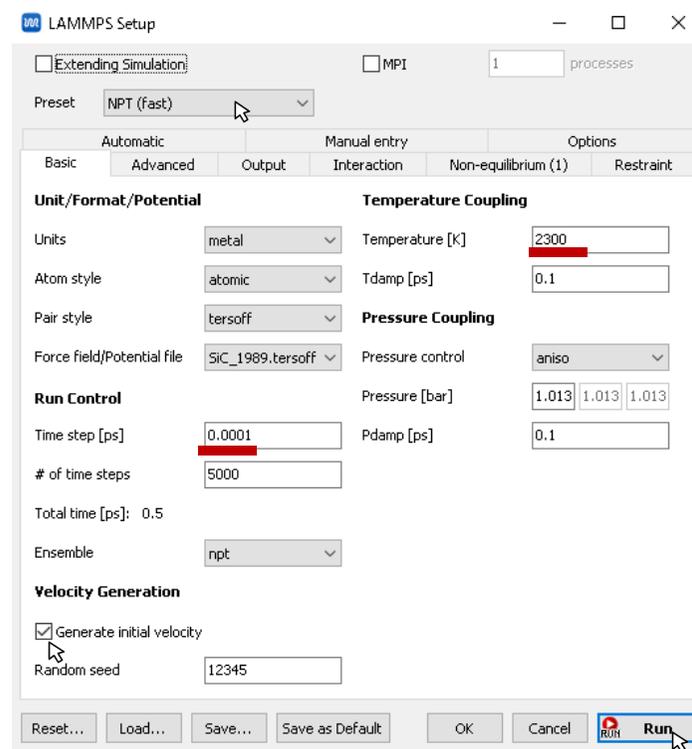
II. 固相の平衡化

1. ソルバー一覧から**LAMMPS**を選択し、 (キーワード設定)を開く。
2. 「電荷が設定されていない分子が含まれます...」と出たら、**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SiC_1989.tersoffに設定し、**OK**をクリックする。



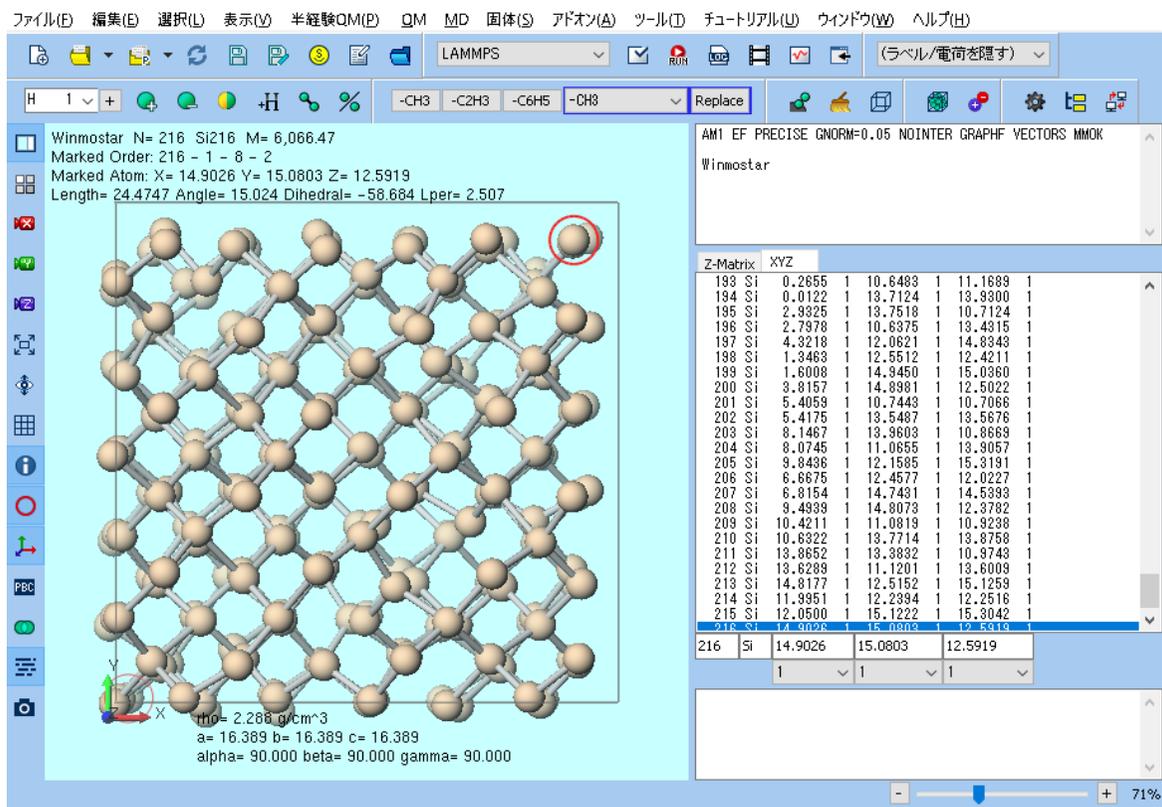
II. 固相の平衡化

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**を**NPT (fast)**、**Time Step**を**0.0001**、**Generate initial velocity**をチェック、**Temperature**を**2300**、**Pressure control**を**aniso**に設定する。
3. **Run**をクリックし、**si333solid**として保存する。



II. 固相の平衡化

1. 計算終了後、 (結果解析) | 最終構造を読み込みをクリックし、デフォルトで選ばれるdataファイルを開く。
2.  (名前を付けて保存)にてsi_solid.cifとして保存する。



Winmostar N= 216 Si216 M= 6,066.47
Marked Order: 216 - 1 - 8 - 2
Marked Atom: X= 14.9026 Y= 15.0803 Z= 12.5919
Length= 24.4747 Angle= 15.024 Dihedral= -58.684 Lper= 2.507

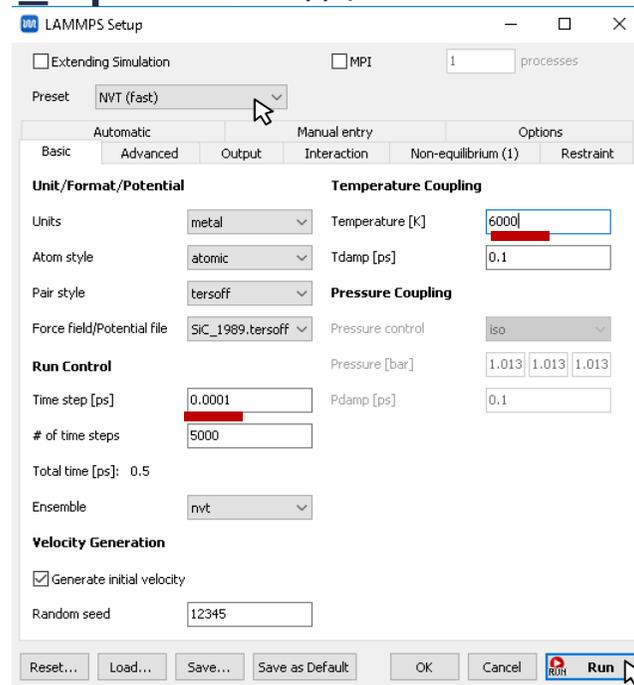
AMI EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK
Winmostar

Z-Matrix	XYZ					
193 Si	0.2855	1	10.6483	1	11.1683	1
194 Si	0.0122	1	13.7124	1	13.9300	1
195 Si	2.9325	1	13.7518	1	10.7124	1
196 Si	2.7978	1	10.6375	1	13.4315	1
197 Si	4.3218	1	12.0621	1	14.8343	1
198 Si	1.3463	1	12.5512	1	12.4211	1
199 Si	1.6008	1	14.9450	1	15.0360	1
200 Si	3.8157	1	14.8981	1	12.5022	1
201 Si	5.4059	1	10.7443	1	10.7066	1
202 Si	5.4175	1	13.5487	1	13.5676	1
203 Si	8.1467	1	13.3603	1	10.8669	1
204 Si	8.0745	1	11.0655	1	13.3057	1
205 Si	9.8436	1	12.1585	1	15.3131	1
206 Si	6.8675	1	12.4577	1	12.0227	1
207 Si	6.8154	1	14.7431	1	14.5393	1
208 Si	9.4939	1	14.8073	1	12.3782	1
209 Si	10.4211	1	11.0819	1	10.9238	1
210 Si	10.6322	1	13.7714	1	13.8758	1
211 Si	13.8852	1	13.3832	1	10.9743	1
212 Si	13.6289	1	11.1201	1	13.6009	1
213 Si	14.8177	1	12.5152	1	15.1259	1
214 Si	11.9351	1	12.2394	1	12.2516	1
215 Si	12.0500	1	15.1222	1	15.3042	1
216 Si	14.9026	1	15.0803	1	12.5919	1

rho= 2.268 g/cm³
a= 16.389 b= 16.389 c= 16.389
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

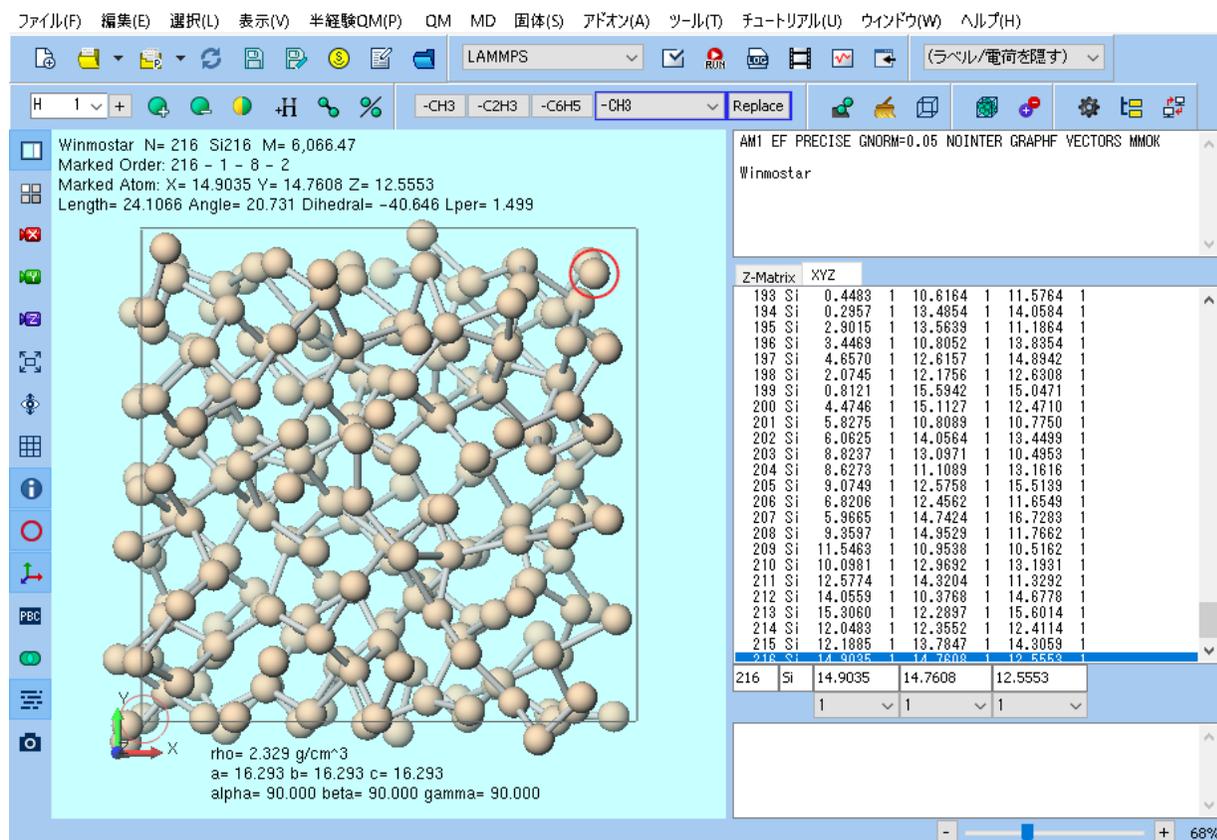
III. 液相の平衡化

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. 「電荷が設定されていない分子が含まれます...」と出たら、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SiC_1989.tersoffに設定し、OKをクリックする。
5. PresetをNVT(fast)、Time Stepを0.0001、Temperatureを6000に設定する。
3. Runをクリックし、si_liquidとして保存する。



III. 液相の平衡化

1. 計算終了後、 (結果解析) | 最終構造を読み込みをクリックし、デフォルトで選ばれるdataファイルを開く。
2.  (名前を付けて保存)にてsi_liquid.cifとして保存する。



Winmostar N= 216 Si216 M= 6,066.47
Marked Order: 216 - 1 - 8 - 2
Marked Atom: X= 14.9035 Y= 14.7608 Z= 12.5553
Length= 24.1066 Angle= 20.731 Dihedral= -40.646 Lper= 1.499

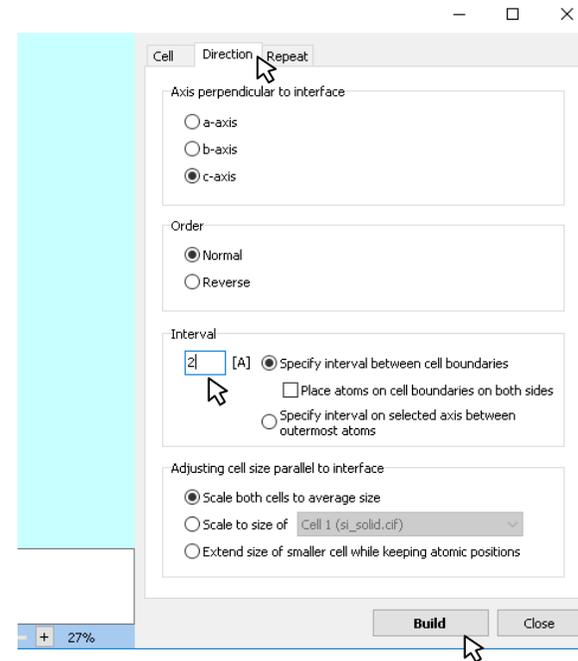
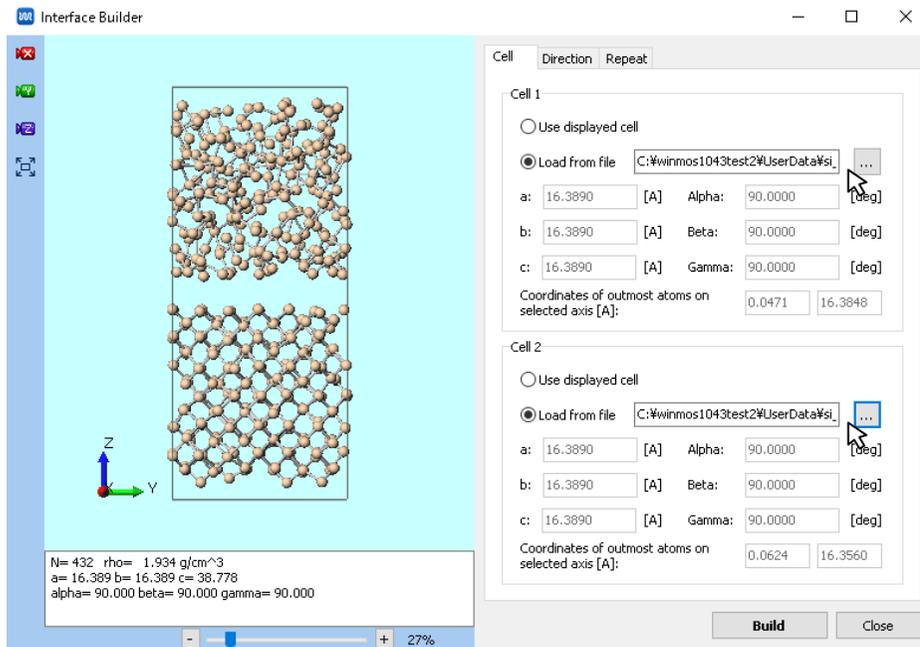
rho= 2.329 g/cm³
a= 16.293 b= 16.293 c= 16.293
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

Z-Matrix	XYZ
193 Si	0.4483 10.6164 11.5764
194 Si	0.2957 13.4854 14.0584
195 Si	2.9015 13.5639 11.1864
196 Si	3.4469 10.8052 13.8354
197 Si	4.6570 12.6157 14.8842
198 Si	2.0745 12.1756 12.6308
199 Si	0.8121 15.5342 15.0471
200 Si	4.4746 15.1127 12.4710
201 Si	5.8275 10.8089 10.7750
202 Si	6.0625 14.0564 13.4499
203 Si	8.8237 13.0971 10.4353
204 Si	8.6273 11.1089 13.1616
205 Si	9.0749 12.5758 15.5139
206 Si	6.8206 12.4562 11.6549
207 Si	5.9665 14.7424 16.7283
208 Si	9.3537 14.9529 11.7682
209 Si	11.5463 10.9538 10.5162
210 Si	10.0981 12.9632 13.1931
211 Si	12.5774 14.3204 11.3292
212 Si	14.0559 10.3768 14.6778
213 Si	15.3060 12.2897 15.6014
214 Si	12.0483 12.3552 12.4114
215 Si	12.1885 13.7847 14.3059

216 Si | 14.9035 | 14.7608 | 12.5553
1 | 1 | 1

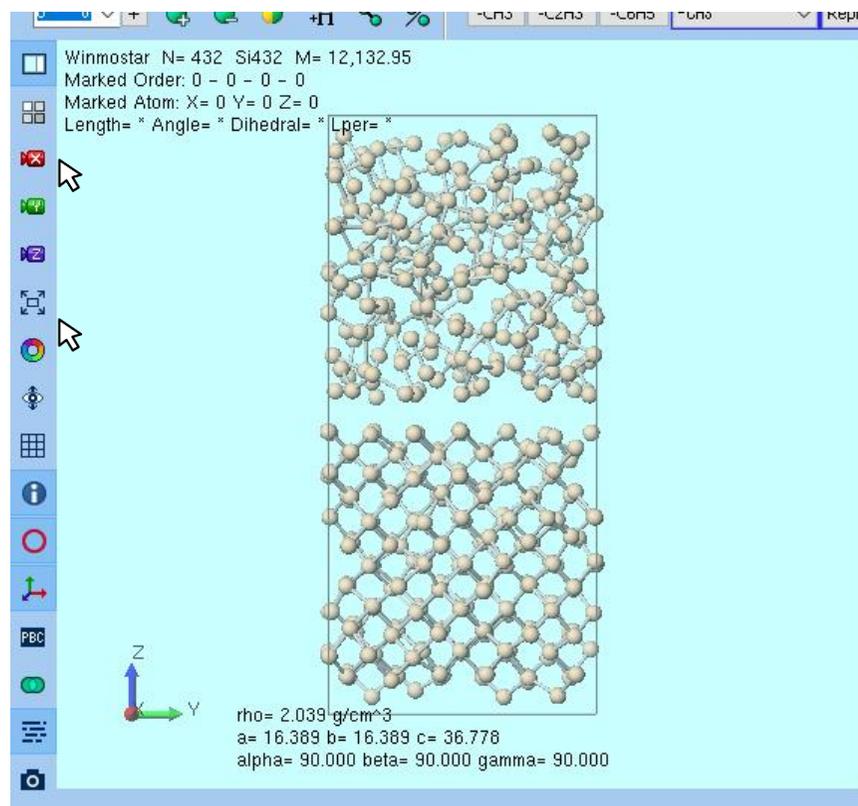
IV. 固液界面系の作成

1. MD | 界面ビルダをクリックする。
2. Cell 1の...ボタンをクリックし、si_solid.cifを選択する。
3. Cell 2の...ボタンをクリックし、si_liquid.cifを選択する。
4. DirectionタブのIntervalを2に設定し、Buildをクリックする。



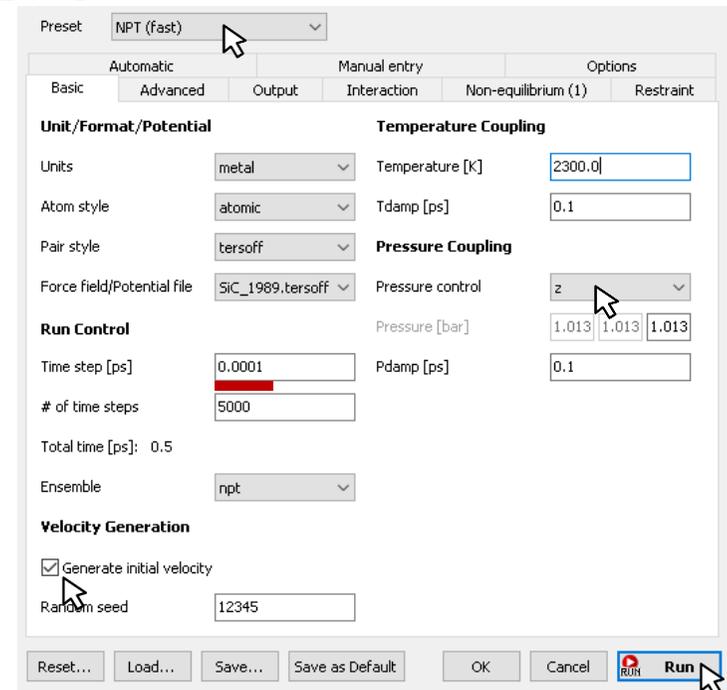
IV. 固液界面系の作成

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



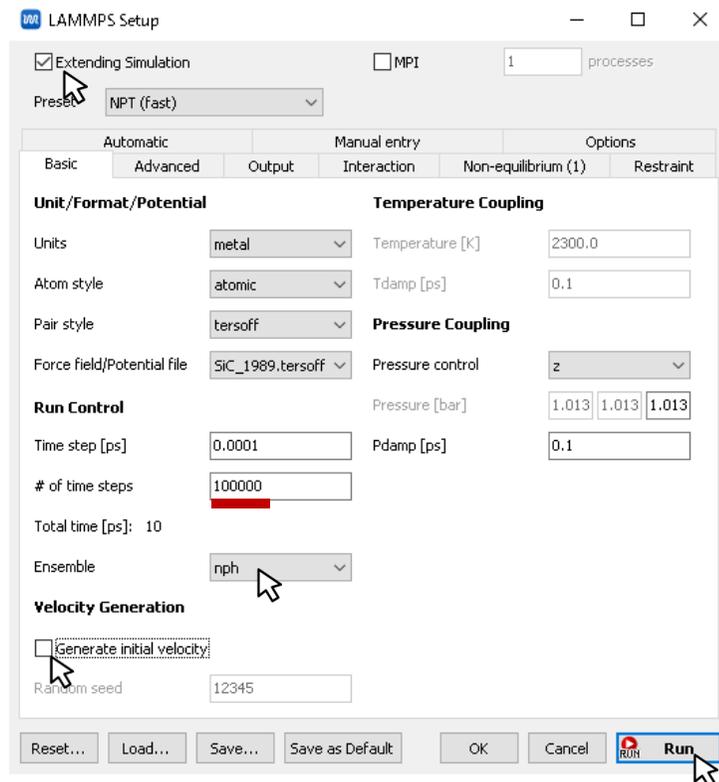
V. 界面系の平衡化

1. (キーワード設定)をクリックし、「電荷が設定されていない分子が含まれます。電荷を設定しますか?」と聞かれたら「いいえ」をクリックする。
2. 「分子ごとに番号がソートされていません。ソートしますか?」と聞かれたら**はい**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 → **Pair Style**を**tersoff**、**Potential File**を**SiC_1989.tersoff**に設定し、**OK**をクリックする。
3. **Preset**を**NPT (fast)**、**Time Step**を**0.0001**、**Generate initial velocity**を**チェック**、**Temperature**を**2300**、**Pressure control**を**z**に設定する。
4. **Run**をクリックし、「si_sle」として保存する。



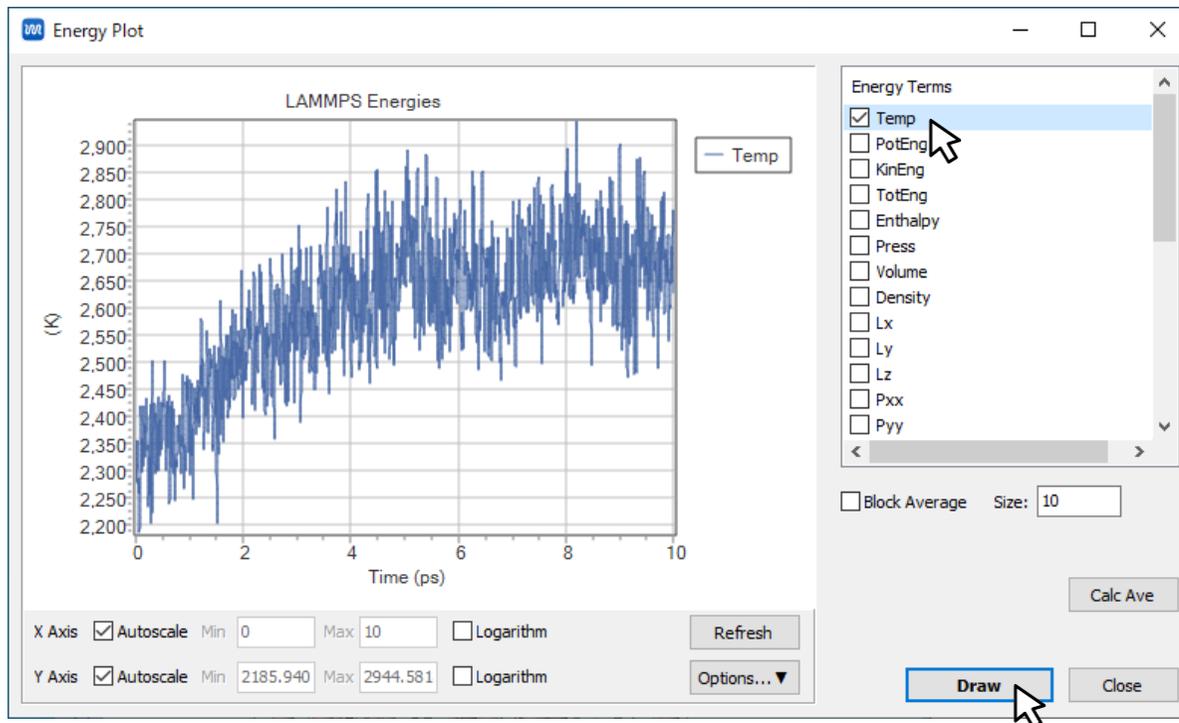
VI. 融点の算出

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Extending Simulation**をチェックし、**# of Time Steps**を**100000**、**Ensemble**を**nph**に設定し、**Generate initial velocity**のチェックを外す。
3. **Run**をクリックする。



VI. 融点の算出

1. 計算終了後、 (エネルギー変化)をクリックし、デフォルトで選ばれるlogファイルを開く。
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る。



この時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る。(参考文献)

ここでの最終温度は2700 K付近であった。一方で平衡化時の温度は2300 K (p16を参照) であった。つまり、この温度は融点ではない。

最終温度 (ここでは2700 K) を平衡化時の温度として採用し、再度II.からVI.までの手順を繰り返す必要がある。

参考文献： S. Yoo, X. C. Zeng and J. R. Morris, J. Chem. Phys., 120, 3, (2004), 1654-1656.

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