

Winmostar - LAMMPS

Tutorial 5

結晶モデリング

V6.019

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/08/02

修正履歴

2015/10/07版

- 初版

2015/10/08版

- (スライド5)ポテンシャルの入手方法を追記

2016/07/27版

- (全般)英字フォントをArialに変更
- (スライド5)EAMポテンシャルの関数型を提示
- (スライド8、9、10)V6.018画面に差し替え

2016/08/02版

- (スライド12、13)動径分布関数による解析を追加

Contents

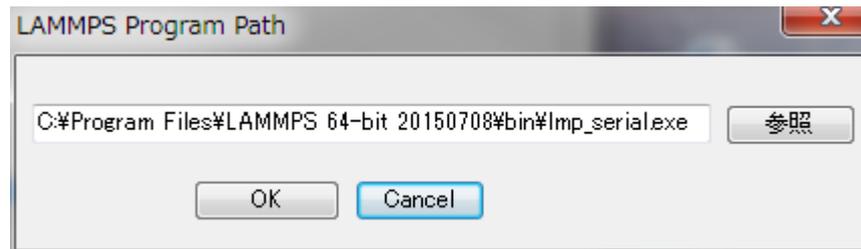
- 0 環境設定
- I. 結晶構造の入手について
- II. 結晶ビルダを用いたNiAl単位格子の作成
- III. LAMMPS計算条件の設定と実行
- IV. 計算結果の確認
- V. 動径分布関数による解析

0 環境設定1

- ① LAMMPS及びcygwinの入手とセットアップ
LAMMPSのサイトからLAMMPSを入手する。さらにX-abilityのサイトからcygwin_wmを入手しセットアップを実施する。詳細は以下のリンク先を参照のこと。
http://winmostar.com/jp/LAMMPS_install_manual_jp_win.pdf

- ② パスの設定
Winmostarのメニュー [その他]→[パスの設定]→[LAMMPS]を選択し「LAMMPS Program Path」画面(下図)にLAMMPSの実行ファイル(imp_serial.exe)を登録し[OK]をクリックする。

※ デフォルトはC:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20160228\bin\imp_serial.exeと表示されるが32ビット版を使用する場合はC:\Program Files\LAMMPS 32-bit 20160228\bin\imp_serial.exeなどに変更する。



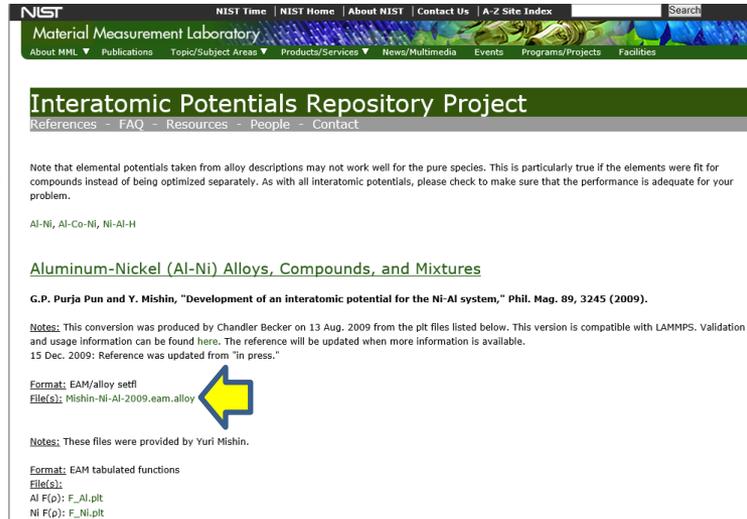
0 環境設定2

③ ポテンシャルファイルの入手

NISTの[Interatomic Potentials Repository Project](http://www.ctcms.nist.gov/potentials/)からLAMMPS用の各種の金属用ポテンシャルファイルを手取できる。ここではNiAl用のEAMポテンシャルをダウンロードする。

URL: <http://www.ctcms.nist.gov/potentials/Al-Ni.html>

ポテンシャルファイル名: [Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy](#)



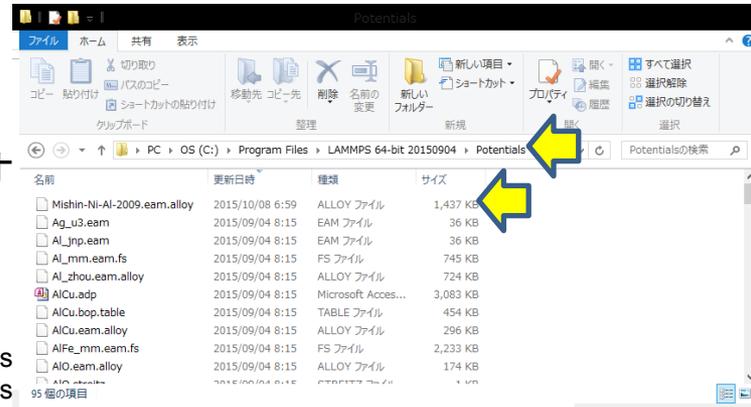
$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij})$$

http://lammps.sandia.gov/doc/pair_eam.html

④ ポテンシャルファイルの格納

LAMMPSをインストールしたフォルダ配下のPotentialsフォルダ内*にダウンロードした[Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy](#)を配置する。

* LAMMPS 32 bit版の場合は、 C:\Program Files\LAMMPS 32-bit 2015XXXX\Potentials
LAMMPS 64 bit版の場合は、 C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 2015XXXX\Potentials
(XXXX の部分はバージョンによって異なる)



I. 結晶構造の入手について

計算対象の元になる単位格子の結晶構造は以下のいずれかの方法で準備する

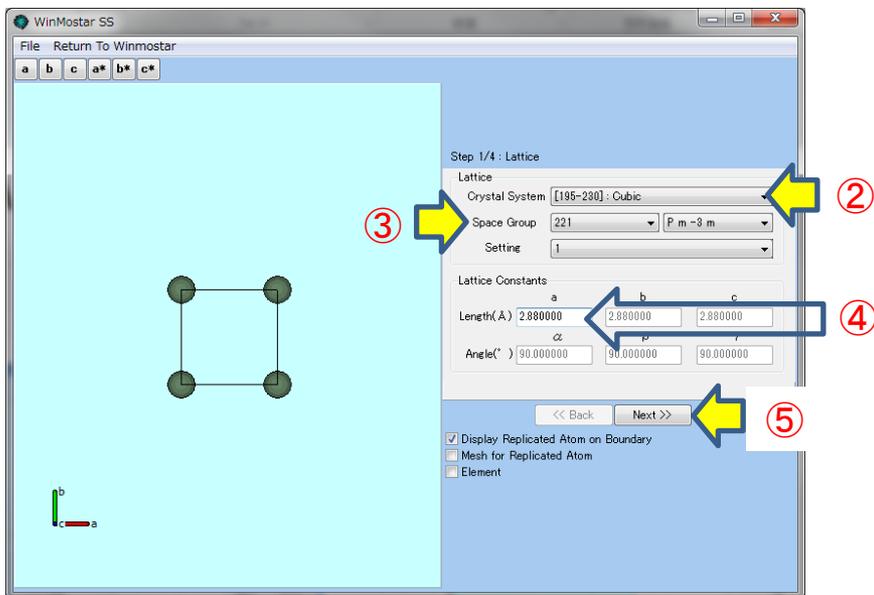
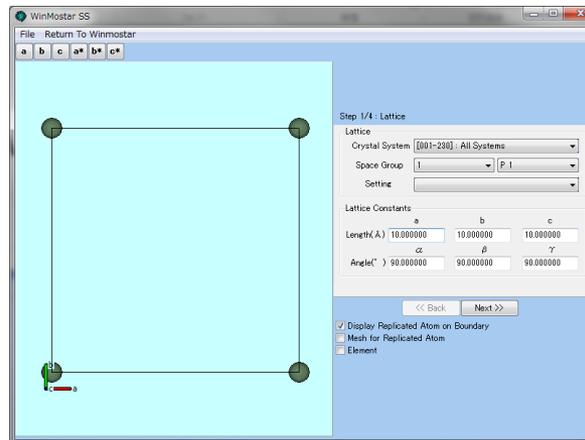
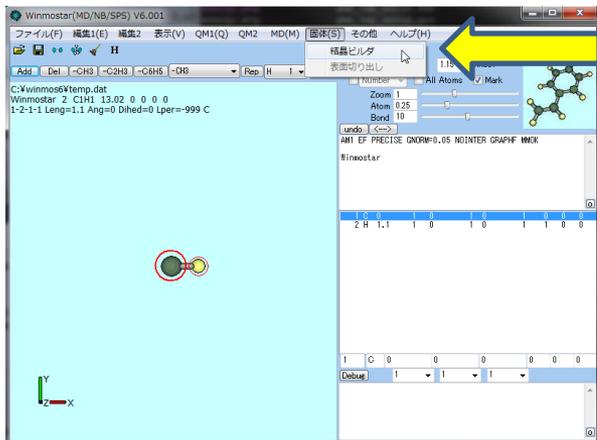
- ① インターネット上の各種サイトから .cif 形式のファイルをダウンロードして入手する。
情報量が豊富で信頼できるサイトとして物質・材料機構(NIMS)が公開している**無機材料データベース (AtomWork)***がある。

AomWorks URL <http://crystdb.nims.go.jp/>

* 利用にはユーザ登録が必要(無料)

- ② 文献などから結晶構造に関する情報を入手し、Wimostarの「結晶ビルダ」を活用してユーザが作成する(次スライド以降で手順を示す)。

II. 結晶ビルダを用いたNiAl単位格子の作成1

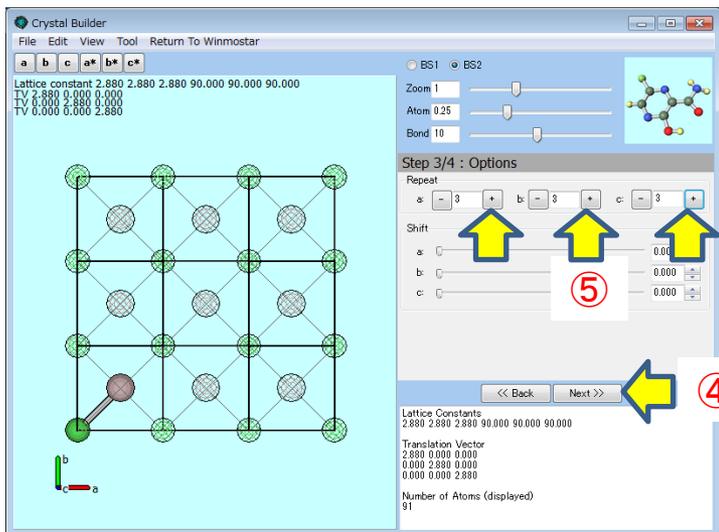
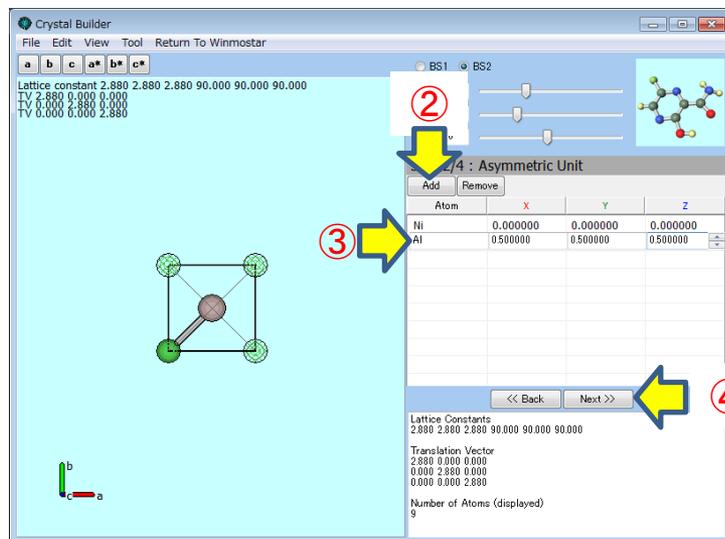
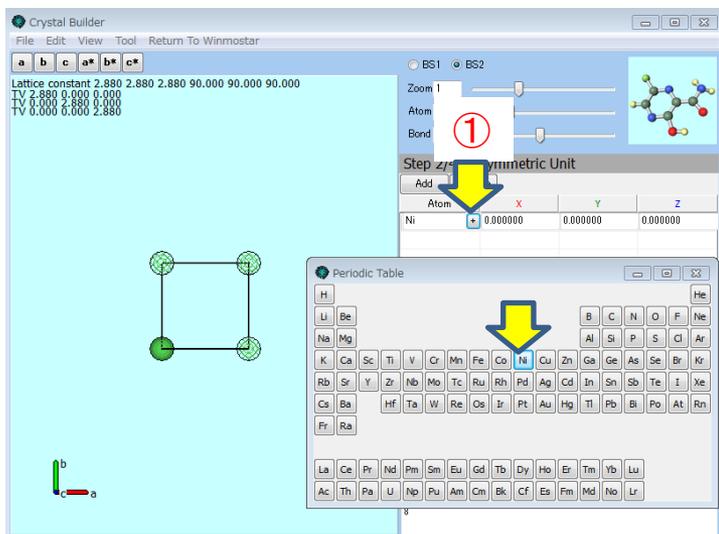


金属間化合物NiAl結晶について

結晶構造: 立方晶、CsCl (B2)型
 空間群: Pm-3m (221)
 格子定数: 2.88 Å
 原子座標: Al (0.5 0.5 0.5)、Ni(0.0 0.0 0.0)

- ① [固体] -> [結晶ビルダ]を立ち上げる。
- ② Crystal Systemで Cubicを選択する。
- ③ Space Group は221を選択する。
- ④ Lattice ConstraintsのLength の aに2.88を入力しEnterを押す。
- ⑤ Nextをクリックする。

II. 結晶ビルダを用いたNiAl単位格子の作成2

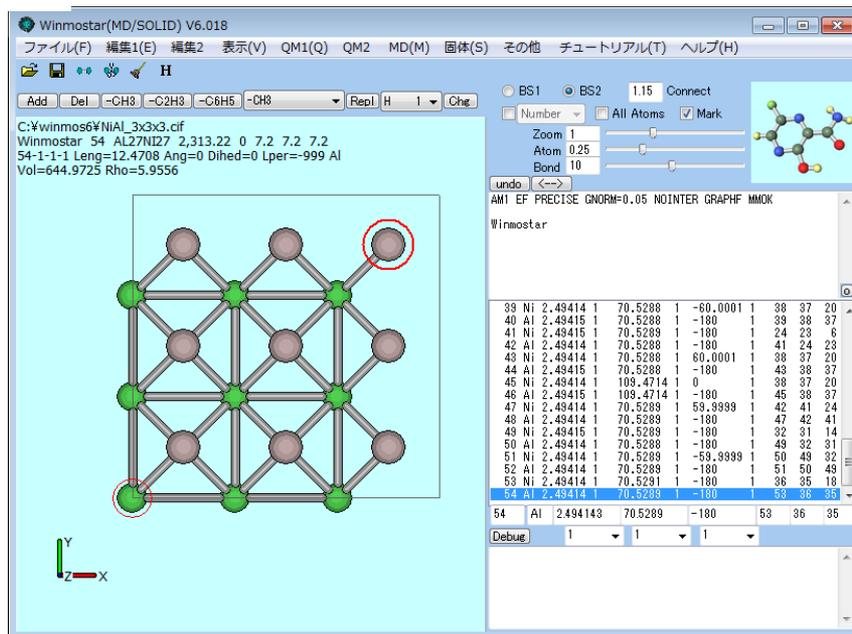
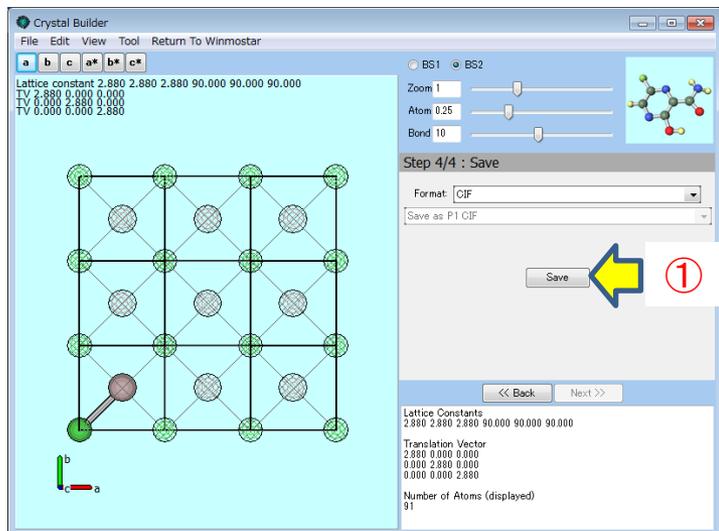


金属間化合物NiAl結晶について

結晶構造: 立方晶、CsCl (B2)型
 空間群: Pm-3m (221)
 格子定数: 2.88 Å
 原子座標: Al (0.5 0.5 0.5)、Ni(0.0 0.0 0.0)

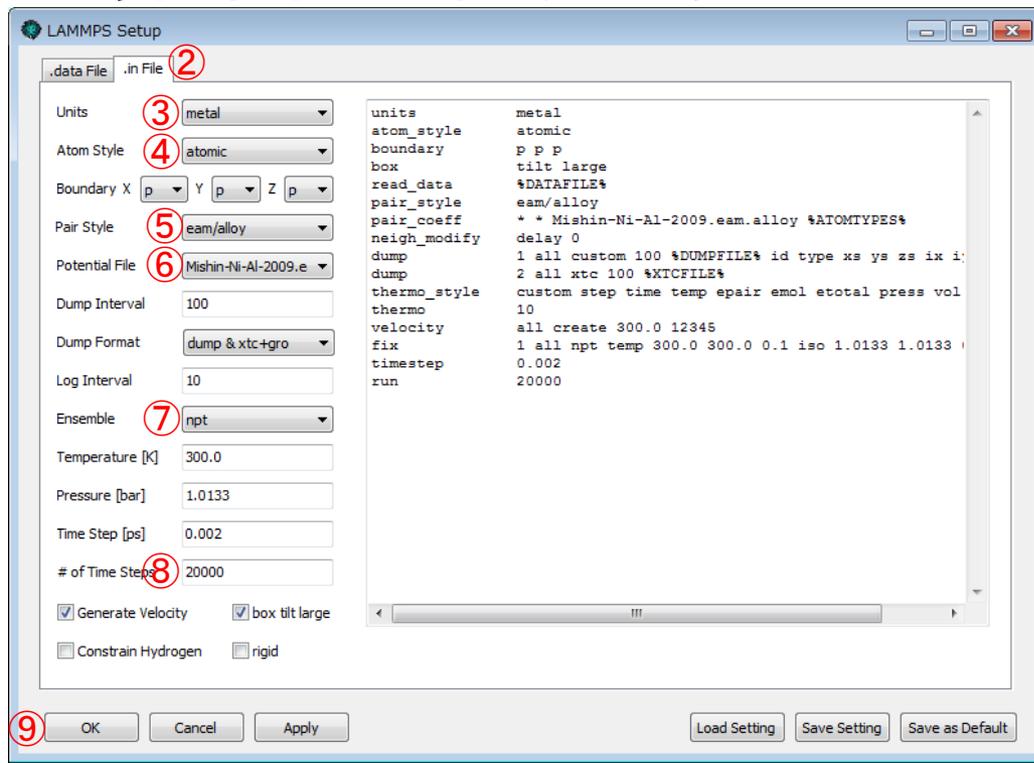
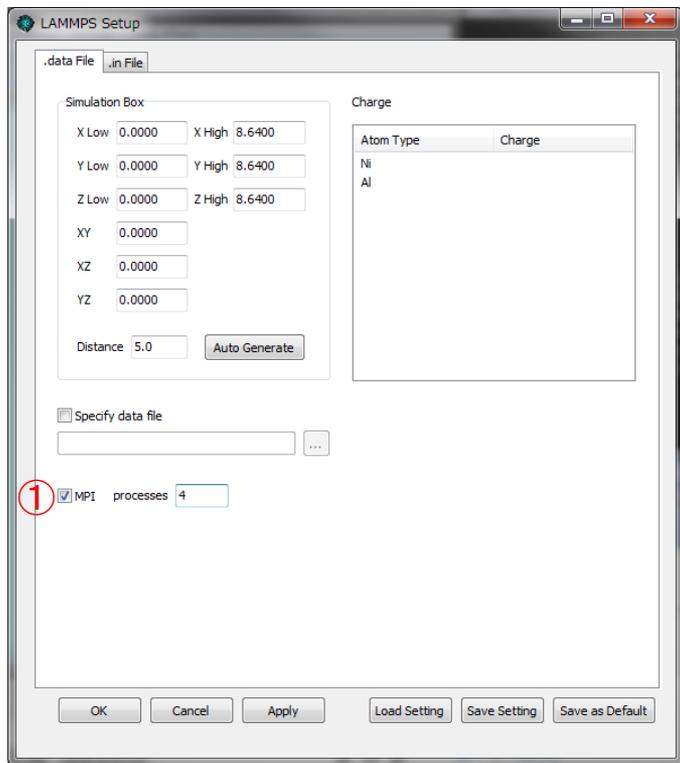
- ① [+]をクリックし周期律表からNiを選択する。
- ② [Add]をクリックする。
- ③ CをAlに置き換えX, Y, Zに全て0.5を設定する。
- ④ Nextをクリックする。
- ⑤ Repeatの a [+]を2回クリックする。同様にb [+]とc [+]を2回クリックする。
- ⑥ Nextをクリックする。

II. 結晶ビルダを用いたNiAl単位格子の作成3



- ① Save をクリックする。
- ② ファイル名を入力して[保存]をクリックする。
- ③ Winmostarのモデリングに反映される。

III. LAMMPS計算条件の設定と実行



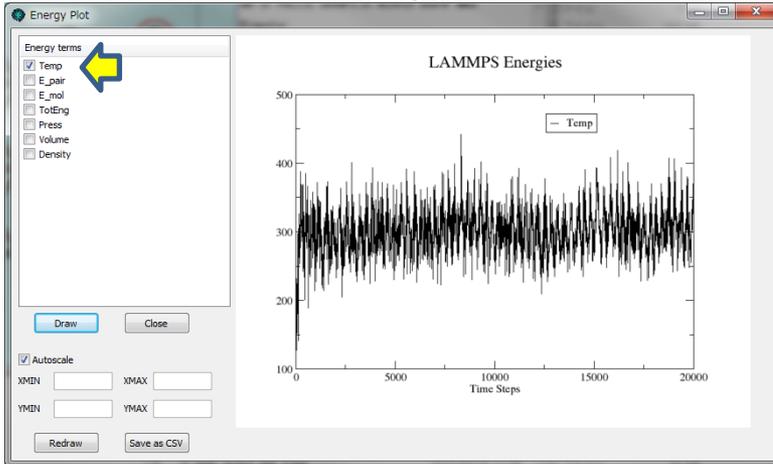
- ① Winmostarで [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、必要に応じてMPIにチェックを入れてprocを指定する。
- ② [.in File]タブを表示させる。
- ③ Unitsをmetal に変更する。
- ④ Atom Style を atomicに変更する。
- ⑤ Pair Styleは eam/alloyを選択する。
- ⑥ Potential Fileは Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy を選択する。
- ⑦ Ensembleをnptに変更
- ⑧ # of timestepsに20000と設定する。
- ⑨ [OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。
- ⑩ [MD]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。

Total wall time: 0:00:22 by 4 MPI Core i5

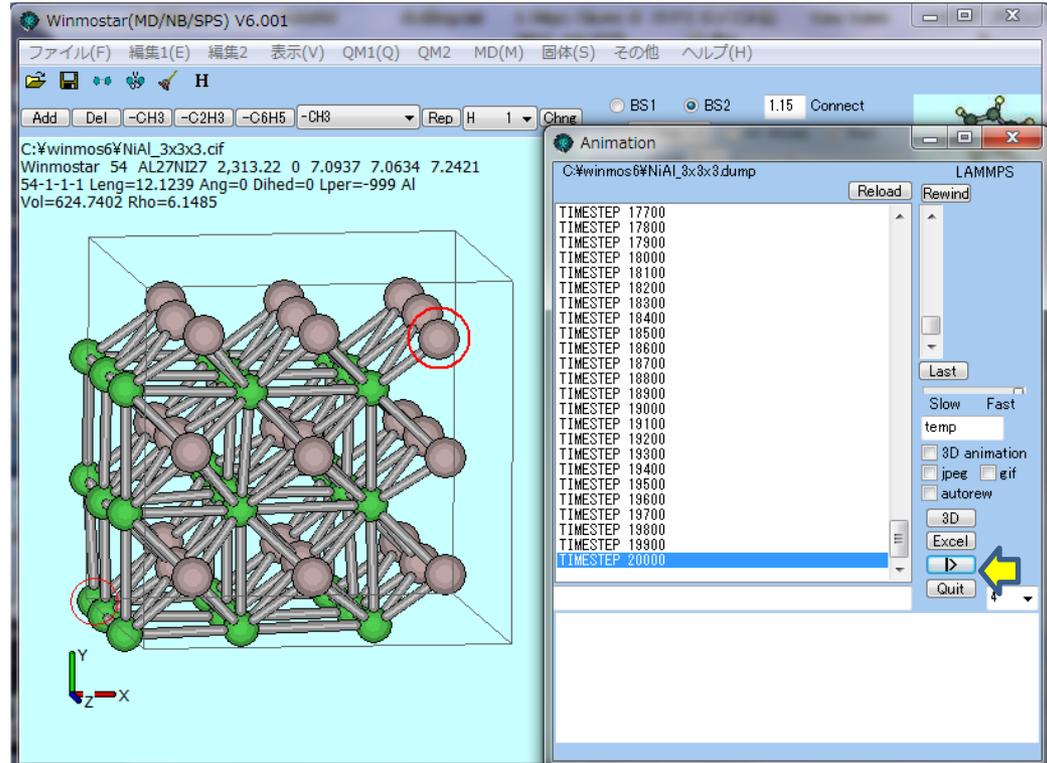
IV. 計算結果の確認

①

温度

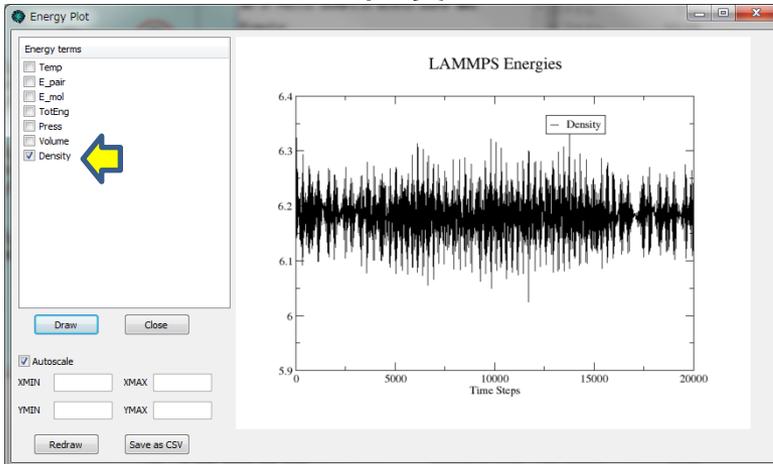


②



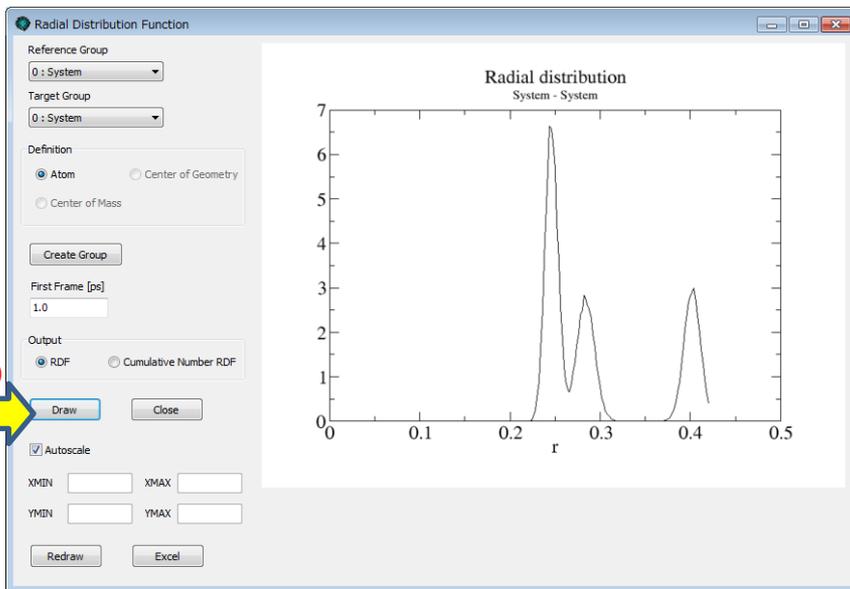
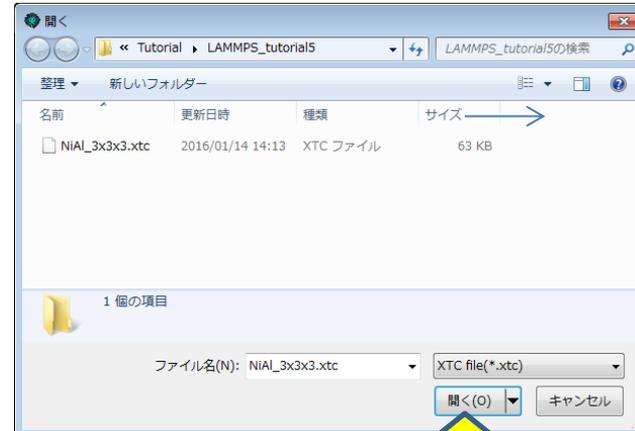
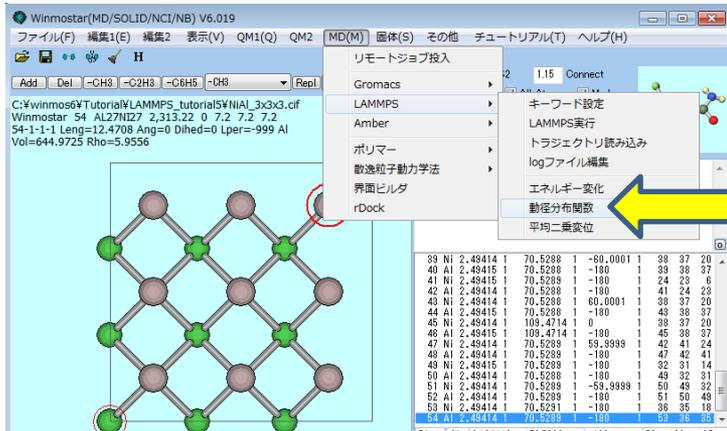
①

密度



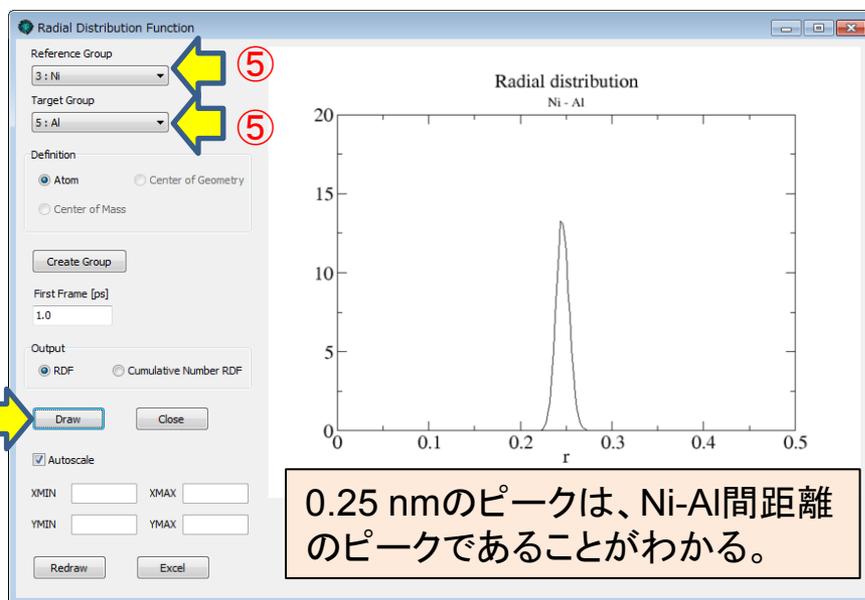
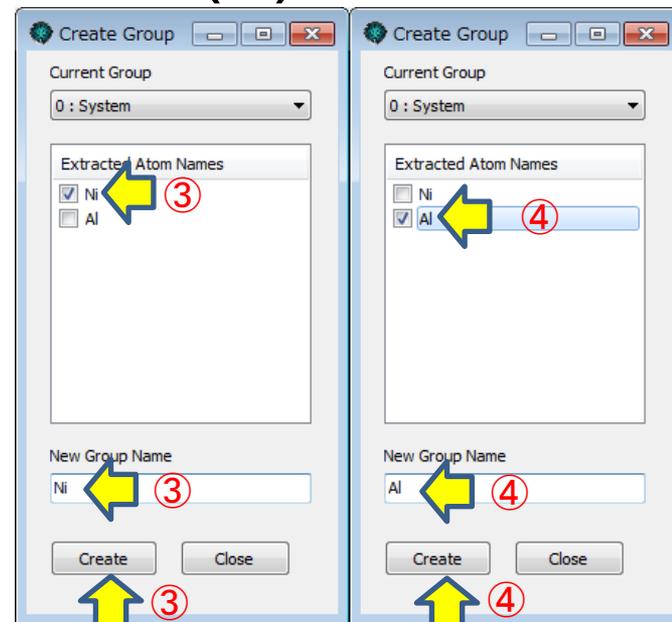
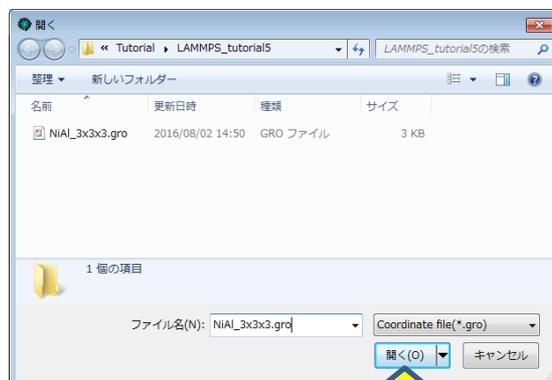
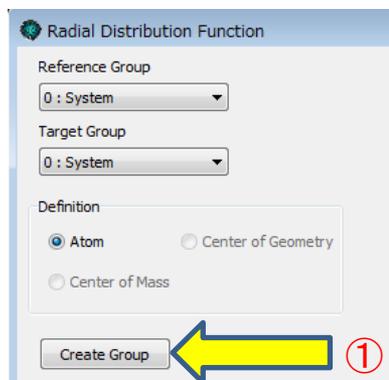
- ① [MD]->[LAMMPS]->[エネルギー変化]で温度変化や密度変化などを表示させ、計算が正常に終了しているか確認する。
- ② [MD]->[LAMMPS]->[トラジェクトリ読み込み]で計算が正常に終了しているか確認する。

V. 動径分布関数による解析(1)



- ① [MD] ->[LAMMPS] -> [動径分布関数]を立ち上げる。
- ② [開く]を3回クリックする。
- ③ [Draw]をクリックする。動径分布関数が表示される。

V. 動径分布関数による解析(2)



- ① [Create Group]をクリックする。
- ② [開く]をクリックする。
- ③ [Ni]にトグルを立て、[New Group Name]にNiと入力し[Create]をクリックする。
- ④ 同様に[Al]にトグルを立て、[New Group Name]にAlと入力し、[Create]をクリックする。
- ⑤ [Reference Group]にNiを、[Target Group]にAlを選択し、[Draw]をクリックする。動径分布関数が表示される。

facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30 · 公開

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38 · 公開

いいね!