

#### Winmostar - LAMMPS Tutorial 5 結晶モデリング <sub>V6.019</sub>

### 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

- 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。 <a href="http://winmostar.com/jp/LAMMPS\_install\_manual\_jp\_win.pdf">http://winmostar.com/jp/LAMMPS\_install\_manual\_jp\_win.pdf</a>
- 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。

LAMMPS Program Path	×
C:¥Program Files¥LAMMPS 64-bit 20150708¥bin¥Imp_serial.exe OK Cancel	参照



### 0 環境設定2

#### ③ ポテンシャルファイルの入手

NISTの<u>Interatomic Potentials Repository Project</u>から LAMMPS用の各種の金属用ポテンシャルファイルを入手 できる。ここではNiAI用のEAMポテンシャルをダウンロード する。

URL: <u>http://www.ctcms.nist.gov/potentials/AI-Ni.html</u> ポテンシャルファイル名: <u>Mishin-Ni-AI-2009.eam.alloy</u>

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

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<u>Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy</u>
   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)



		Potentia	IS			
ファイル ホーム 共有 表示						<u>^</u>
□ビー 貼り付け 家 ショートカットの貼り付	<b>移動先 コピー先</b>	★ ■ 前の 変更 77	<ul> <li>         ・一部 新しい項目・         ・         ・         ・</li></ul>	→ 日本	<ul> <li>■ すべて選択</li> <li>◎ 選択解除</li> <li>■ 選択の切り替え</li> </ul>	
クリップボード	整	理	新規		選択	
€ ∋ + ↑ 🎍 > PC > OS (	C:) → Program Files	→ LAMMPS 64-bit	20150904 → Potentia	ls C	Potentialsの検索	Q
名前	更新日時	種類	<b>ม</b> ีสุรั			
Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy	2015/10/08 6:59	ALLOY ファイル	1,437 KB			
Ag_u3.eam	2015/09/04 8:15	EAM ファイル	36 KB			
Al_jnp.eam	2015/09/04 8:15	EAM ファイル	36 KB			
Al_mm.eam.fs	2015/09/04 8:15	FS ファイル	745 KB			
Al_zhou.eam.alloy	2015/09/04 8:15	ALLOY ファイル	724 KB			
AlCu.adp	2015/09/04 8:15	Microsoft Acces	3,083 KB			
AlCu.bop.table	2015/09/04 8:15	TABLE ファイル	454 KB			
AlCu.eam.alloy	2015/09/04 8:15	ALLOY ファイル	296 KB			
AlFe_mm.eam.fs	2015/09/04 8:15	FS ファイル	2,233 KB			
AlO.eam.alloy	2015/09/04 8:15	ALLOY ファイル	174 KB			
95 個の項目	2015/00/04 0:15	CTDE177 7- /#	1 1/0			811



#### 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

 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 <u>http://crystdb.nims.go.jp/</u> \*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)。

#### ★ X-Ability □ A Marging 1



#### ₩<sup>X-Ability</sup> Ⅱ. 結晶ビルダを用いたNiAl単位格子の作成2



#### ★ X-Ability □ A X-Ability □

Orystal Builder			🔇 名前を付けて保存	
File Edit View Tool Return To Winmostar				
a b c a* b* c* Lattice constant 2.880 2.880 90.000 90.000 90.000 TV 2.880 0.000 0.000 TV 0.000 0.680 2.880 TV 0.000 0.680 2.880	BS1         BS2           Zoom 1		ファイル名(N):         NIAI_3x3x3         (2)           ファイルの種類(T):         CIF(*.cif)	▼ ◆ winmosbuy便乘
	Step 4/4 : Save	$\longrightarrow$	<ul> <li>フォルダーの参照(B)</li> </ul>	保存(S) キャンセル
	Save (1)			
	K Back Next >>		↓ ↓	
	2.880 2.880 2.880 90.000 90.000 90.000		3	
<b>≬</b> ⊳	2.880 0.000 0.000 0.000 2.880 0.000		Winmostar(MD/SOLID) V6.018	
c_ a	0.000 0.000 2.880 Number of Atoms (displayed)		ファイル(F) 編集1(E) 編集2 表示(V) QM1(Q) QM2 MD(M) [	固体(S) その他 チュートリアル(T) ヘルプ(H)
	91		🖙 🖬 👐 🌼 🖌 H	O PC1 O PC1 115 Connect
		I	Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 • Repl H 1 •	Che Number All Atoms Mark
			C:¥winmos6¥NiAI_3x3x3.cif Winmostar 54 AL27NI27 2.313.22 0 7.2 7.2 7.2	Zoom 1
			54-1-1-1 Leng=12.4708 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999 Al Vol=644.9725 Rho=5.9556	Atom U25 Bond 10
				AM1 FF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHE MMOK
				Winnostar
				39 Ni 2.49414 1 70.5288 1 -60.0001 1 38 37 20 40 Al 2 49415 1 70.5288 1 -100 1 38 37 20
① Save をクリックする。				41 Ni 2.49415 1 70.5289 1 -180 1 24 23 6 42 Al 2.49414 1 70.5288 1 -180 1 41 24 23
② ファイル名を入力して[保存]を	<i>:</i> クリックする。			43 Ni 2.49414 1 70.5288 1 60.0001 1 38 37 20 44 Al 2.49415 1 70.5288 1 -180 1 43 38 37
③ Winmostarのモデリングに反	.映される。			45 Ni 2.49414 1 109.4714 1 0 1 38 37 20 46 Al 2.49415 1 109.4714 1 -180 1 45 38 37 47 Ni 2.49414 1 70 5999 1 59 9999 1 42 41 24
-				47 NI 2.49414 1 70.5289 1 -180 1 47 42 41 49 NI 2.49415 1 70.5289 1 -180 1 43 23 1 4
				50 AI 2.49414 1 70.5288 1 -180 1 49 32 31 51 Ni 2.49414 1 70.5289 1 -59.9999 1 50 49 32
				52 AI 2.43414 I 70.5233 I -180 I 51 50 49 53 Ni 2.49414 I 70.5291 I -180 I 36 35 18 54 AI 2.49414 I 70.5291 I -180 I 52 35 35 -
				54 AI 2.494143 70.5289 -180 53 36 35
			٩Y	Debug 1 • 1 • 1 •
			z—x	·
				· ·

#### ★ X-Ability Juane 111. LAMMPS計算条件の設定と実行

<ul> <li>Winnostarで [MD]&gt;[LAMMPS]&gt;-[+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。</li> <li>Unitsをmetal ic変更する。</li> <li>Patrix ic Monostarで [MD]&gt;-[LAMMPS]&gt;-[+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。</li> <li>Unitsをmetal ic変更する。</li> <li>Patrix ic Monostarで [MD]&gt;-[LAMMPS]&gt;-[+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。</li> <li>Unitsをmetal ic変更する。</li> <li>Patrix ic Monostarで [MD]&gt;-[LAMMPS]&gt;-[+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。</li> <li>In File (Patrix Monostarで MD)&gt;-[LAMMPS]&gt;-[+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。</li> <li>In File (Patrix Monostarで MD)&gt;-[LAMMPS]&gt;-[+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。</li> <li>In File (Patrix Monostarで MD)&gt;-[LAMMPS]&gt;-[+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。</li> <li>In File (Patrix Monostar Component) A Monostar (MD)&gt;-[LAMMPS]&gt;-[+-ワート: 設定 manostar (MD)&gt;-[LAMMPS]&gt;-[+-ワート: 設定 manostar (MD)&gt;-[+-D]&gt;-[+]</li> </ul>	LAMMPS Setup	Q LAMMPS Setup	
<ul> <li>Within the 1440 t</li></ul>	.data File _in File	.data File .in File 2	
OK       Cancel       Apply       Load Setting       Save as Default         ①       Winmostarで [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、必要に応じてMPII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 & atomicIc変更する。         ⑤       Pair StyleId eam/alloyを選択する。         ⑥       Potential FileId Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy を選択する。         ⑦       EnsembleをnptIc変更         ⑧       # of timestepsIc20000と設定する。         ⑧       [OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。         ⑧       [MD]->[LAMMPS]->[LAMMPS表記動する。	Simulation Box   X Low 0.0000   Y High 8.6400   Z Low 0.0000   Z High 8.6400   XY   0.0000   YZ   YZ   YZ   YZ   YZ   YZ   YZ   YZ <th>Units 3 metal Atom Style 4 atomic • Boundary X p • Y p • Z p • Pair Style 5 eam/alloy • Potential File 6 Mishin-Ni-Al-2009.e • Dump Interval 100 Dump Format dump &amp; xtc+gro • Log Interval 10 Ensemble 7 npt • Temperature [K] 300.0 Pressure [bar] 1.0133 Time Step [ps] 0.002 # of Time Step 8 20000 Ø Generate Velocity Ø box til large Constrain Hydrogen ingid</th> <th><pre>inits metal itom_style atomic yp p p yox tilt large read_data *DATAFILE* yair_style eam/alloy yair_coeff * * Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy %ATOMTYPES* ieigh_modify delay 0 immp 1 all custom 100 %DUMPFILE* id type xs ys zs ix i: immp 2 all xtc 100 %ATOFILE* thermo_style custom step time temp epair emol etotal press vol hermo_10 relocity all create 300.0 12345 fix 1 all npt temp 300.0 300.0 0.1 iso 1.0133 1.0133 i immstep 0.002 run 20000</pre></th>	Units 3 metal Atom Style 4 atomic • Boundary X p • Y p • Z p • Pair Style 5 eam/alloy • Potential File 6 Mishin-Ni-Al-2009.e • Dump Interval 100 Dump Format dump & xtc+gro • Log Interval 10 Ensemble 7 npt • Temperature [K] 300.0 Pressure [bar] 1.0133 Time Step [ps] 0.002 # of Time Step 8 20000 Ø Generate Velocity Ø box til large Constrain Hydrogen ingid	<pre>inits metal itom_style atomic yp p p yox tilt large read_data *DATAFILE* yair_style eam/alloy yair_coeff * * Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy %ATOMTYPES* ieigh_modify delay 0 immp 1 all custom 100 %DUMPFILE* id type xs ys zs ix i: immp 2 all xtc 100 %ATOFILE* thermo_style custom step time temp epair emol etotal press vol hermo_10 relocity all create 300.0 12345 fix 1 all npt temp 300.0 300.0 0.1 iso 1.0133 1.0133 i immstep 0.002 run 20000</pre>
<ol> <li>Winmostarで [MD]-&gt;[LAMMPS]-&gt;[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。</li> <li>[.in File]タブを表示させる。</li> <li>Unitsをmetal に変更する。</li> <li>Atom Style を atomicに変更する。</li> <li>Pair Style (a eam/alloyを選択する)</li> <li>Potential File(は Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy を選択する。</li> <li>Ensembleをnptに変更</li> <li># of timestepsに20000と設定する。</li> <li>[OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。</li> <li>[MD]-&gt;[LAMMPS]-&gt;[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。</li> </ol>	OK Cancel Apply Load Setting Save as Default	9 OK Cancel Apply	Load Setting Save Setting Save as Default
	<ol> <li>Winmostarで [MD]-&gt;[LAMMPS]-&gt;[キーワード設定]画面を開</li> <li>[.in File]タブを表示させる。</li> <li>Unitsをmetal に変更する。</li> <li>Atom Style を atomic[ご変更する。</li> <li>Pair Style[は eam/alloyを選択する。</li> <li>Potential File[は Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy を選択する。</li> <li>Ensembleをnpt[ご変更</li> <li># of timesteps[ご20000と設定する。</li> <li>[OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。</li> <li>[MD]-&gt;[LAMMPS]-&gt;[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起</li> </ol>	 <sup>県</sup> き、必要に応じてMPIにチェックを入れてpr 。 起動する。	rocを指定する。





2016/08/02

 $\mathbf{X}$  - Ability



## V. 動径分布関数による解析(1)



2016/08/02



## V. 動径分布関数による解析(2)





