

Winmostar チュートリアル LAMMPS 合金系

V7.016

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/3/30



Contents

- 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



環境設定(1/2)

 LAMMPS及びCygwinの入手とセットアップ 以下のリンク先の「Windows版LAMMPSのインストール手順」に従い、LAMMPSおよびCygwin をセットアップする。

https://winmostar.com/jp/manual_jp.html

2. 計算エンジンのインストール	Windows 版 LAMPS インストールマニュアル
Windows版	2016/06/13
<mark>cygwin_wm_v7_20160926.exe</mark> (418MB) ※NMChem, Gromacs, Amber Windowsビルド済パッケ (上級者向ナ)NMChem, Gromacs, AmberのCygwin用インストール手順 ※cygwin_wm_v7_2	 LAMMPSの入手 サイトにアクセスする。<u>http://rpm.lammps.org/windows.html</u> インストール先の OS に応じて[32-bit Windows download area]もしくは[64-bit Windows
V6用NWChem ※Windowsビルド済パッケージ GAMESSのインストール手算	download arealをクリックする。 LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository The repositor is huding pre-compiled Workson installers of the LAMPES inductor software package. The
LAMMPSのインストール手順 Quantum ESPRESSOのインストール手順	bravers are buit sem-advantatal with MinRWM Linux to Windows cross complex using in-b-date supported or the Vindows Charles Control git register toolsed at the source defaultion of Company and MinReads Simplex and Tempie University. The UAMPE Sources in the Vindows Company and Company theory Company and Company (requires external Norma), SEAX supervised by the USER-LEAKAC package which is included. The serial excercise and could be also and company demonstration to MinRW and USER is for the control of the Control of the Control of the Section and Control of the Company demonstration to MinRW and USER is for the control of the Control of the control advices afford (short) and the control of the MinRW and USER is for the control of the Control of the control advices afford (short) and the control of the MinRW and USER is for the control of the Control of the control advices afford (short) and the control of the MinRW and USER is for the control of the



環境設定(2/2)

• 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

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。



ファイル ホーム 共有 表示						^ ?
□ □ □ ↓ 切り取り □ □ □ □ ↓ □ / □ スのコピー □ ↓ □ − りかいの貼り	レント 100 100 100 100 100 100 100 100 100 10	 ・ 	 新しい項目・ 新しい項目・ ショートカット・ オルダー 	□ パティ 日本	■ すべて選択 ※ 選択解除 ● 選択の切り替え	
クリップボード	整	理	新規		選択	
(→ + ↑) → PC → OS (C:) → Program Files	→ LAMMPS 64-bit	20150904 → Potential	s o	Potentialsの検索	Q
久前	再新日時	領利	++ / 7			^
	201110	(IIIAR				
Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy	2015/10/08 6:59	ALLOY ファイル	1,437 KB			- 1
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 7711	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 7711	296 KB			
AlFe mm.eam.fs	2015/09/04 8:15	FS ファイル	2,233 KB			
AlO.eam.allov	2015/09/04 8:15	ALLOY ファイル	174 KB			
	2015/00/04 0:15	CTREITZ De Zu	1 1/0			×
95 個の項目						800 🖬

^{*} 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)



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」を活用して単位格子を作成する。次に単位格子を3x3x3に拡張する(モデリングのチュートリアル『結晶ビルダ』参照)。

金属間化合物NiAI結晶

Ι.

結晶構造:立方晶 (cubic) 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)





 \mathbf{X} - Ability

Copyright (C) 2017 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.

★ X-Ability Juane 11 III. LAMMPS計算条件の設定と実行

- ① [MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、画面右下の[Reset]をクリックする。
- ② Unitsをmetal に変更する。
- ③ Pair Styleは eam/alloyを選択する。
- ④ Potential Fileは Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy を選択する。
- ⑤ Ensembleをnptに変更する。
- ⑥ [OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じ、[MD]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。

Time Step [ps] # of Time Steps Ensemble Temperature [K] Pressure [bar]	0.002 5000 npt v 300.0 1.013 1.013 1.013 Loy \$ATOMTYPES\$	Generate Veloc	iso	
# of Time Steps Ensemble Temperature [K] Pressure [bar]	5000 npt v 300.0 1.013 1.013 1.013 Loy \$ATOMTYPES\$	Pressure Control	iso	-
Ensemble Temperature [K] Pressure [bar]	npt v 300.0 1.013 1.013 1.013 Loy \$ATOMTYPES\$			1
Temperature [K] Pressure [bar]	300.0 1.013 1.013 1.013			1
Pressure [bar]	1.013 1.013 1.013			1
Al-2009.eam.all	Loy %ATOMTYPES%			,
XTCFILE% 0 12345 300.0 300.0 0. 50 linear 1 1 ne temp pe ke e	ld type xs ys zs ix 1 tchain 3 iso 1.0 1 stotal enthalpy pre	: iy iz 133 1.0133 0.1 ss vol density	pchain 3 lx ly lz pxx p	2
			2	
	solinear 1 1 me temp pe ke e	S0 linear 1 1 1 S0 linear 1 1 1 e temp pe ke etotal enthalpy pre	Load Setting Save Setting Save	Solio Solio Solio Childran S 180 1.0133 1.0133 0.1 penan S Solinear 1 1 1 e temp pe ke etotal enthalpy press vol density 1x 1y 1z pxx p

Copyright (C) 2017 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.

IV. 計算結果の確認



 \mathbf{X} - Ability



V. 動径分布関数による解析(1)



Copyright (C) 2017 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



V. 動径分布関数による解析(2)







Copyright (C) 2017 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.