

# Winmostar チュートリアル LAMMPS 膨張係数計算

# 株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/01



## 概要·注意点

- 本チュートリアルでは、Si結晶(1,0,0)面の1,000 Kにおける線膨張係数を計算 する方法を紹介します。
- 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、昇温速度も結果に影響を与えます。
- フィッティングは各種のグラフソフトや解析ソフトで実施することをお勧めします。



# 環境設定

 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 LAMMPS インストールマニュアル   |
|---|--|
| Windows版  | 2016/06/13   |
|   | 1. LAMMPSの入手   |
| <mark>cygwin_wm_v7_20160926.exe</mark> (418MB) ※NMChem, Gromacs, Amber Windowsビルド済バッケ | ① サイトにアクセスする。 <u>http://rpm.lammps.org/windows.html</u>  |
| (上級者向ナ)NWChem, Gromacs, AmberのCygwin用インストール手順 ※cygwin_wm_v7_2                         | 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ビルド済バッケージ   | download area]をクリックする。   |
| GAMESSのインストール手順   | LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository   |
| LAMMPSのインストール手順   | This repository is hearing pre-complexit Whokevs installes of the LAMME's molecular dynamics simulation software package. The<br>branera set bit sem-advantumed with hearingVet Lamberge science and a supported of the LAMME's molecular bit<br>of resository installer at the installes in <i>Computational Molecular Science</i> , at Tempe Linkers The LAMME's functions contain all<br>optional juscipies included in the Source distribution users (KM) (Longers en GPC), control does and an<br>advantume of the Lamberge science and the source distribution users (KM) (Longers en GPC), control does and advantume of the<br>advantume of the source distribution users (KM) (Longers en GPC), control does and advantume of the<br>advantume of the source distribution users (KM) (Longers en GPC), control does and advantume of the<br>advantume of the source distribution users (KM) (Longers en GPC), control does and advantume of the<br>advantume of the source distribution users (KM) (Longers en GPC), control does and the<br>advantume of the source distribution advantume of the source advantume of the<br>advantume of the source distribution of the source distribution of the<br>advantume of the source distribution of the source distribution of the<br>advantume of the source distribution of the source distribution of the<br>advantume of the source distribution of the source distribution of the source of the sour |
| Quantum ESPRESSOのインストール手順   | support cross compilations. (EXCRG) and USER.NFEL (do not support cross-compilation with OCC, USERE-HEAVE, degraines solutional<br>https://graines.external.iterations/international-and-provided international-intern                               |



#### 系の作成

#### 本チュートリアルでは、シリコンの融点を計算する。 [固体]-[結晶ビルダ]を起動し、[File]-[Open]からサンプルフォルダ内のsi.cifを開く。 (デフォルトではC:¥winmos8¥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 Builder File Edit View Tool Crystal system: Cubic b c a\* b\* c\* а O Plain 
 Normal Space group : Fd-3m (227) attice constant 5,431 5,431 5,431 90,000 90,000 90,000 Zoom Lattice constants : a=5.4309 Å Atom 0.25 Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0) Bond 10 Asymmetric Unit Add Remove Atom х z Si 0.000000 0.000000 0.000000 Si 0.000000 0.500000 0.500000 Si 0.500000 0.500000 0.000000 Si 0.500000 0.000000 0.500000 Si 0.750000 0.250000 0.750000 Si 0.250000 0.250000 0.250000 Si 0.250000 0.750000 0.750000 Si 0.750000 0.750000 0.250000 Lattice Constants 5.431 5.431 5.431 90.000 90.000 90.000 Translation Vector 5.431 0.000 0.000 0.000 5.431 0.000 0.000 0.000 5.431 Number of Atoms (displayed) 18

Copyright (C) 2018 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



#### I. 系の作成

[Edit]-[Repeat]にて3 x 3 x 3のセルを作成する。その後、[File]-[Save]にて 構造を保存する。ここでは仮にファイル名を「si333.cif」とする。



Copyright (C) 2018 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



#### II. 系の平衡化

固体ビルダは[File]-[Exit]で閉じ、メイン画面の[ファイル]-[開く]から先ほどの 「si333.cif」を開く。次に、[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックする。



Copyright (C) 2018 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



#### Ⅱ. 系の平衡化

「Preset」に「NPT (fast)」を選択する。「Units」に「metal」、「Pair Style」に「tersoff」、 「Potential File」に「Si.tersoff」、「Generate Velocity」をチェック、「Temperature」に 「800」、「Pressure Control」に「aniso」を指定し「OK」ボタンをクリックする。

| 80  |   | LAMMPS Setup                  | _                 | - 🗆 ×             |  |  |  |
|---|---|-------------------------------|-------------------|-------------------|--|--|--|
| Extending Simula  | tion Preset   | NPT (fast)                    |                   | 1 processes       |  |  |  |
| Basic Advance C   | Output Interaction Non-equilibrium  | n (1) Restraint Automatic Op. | s Force Field     |                   |  |  |  |
| Units   | metal V Time Ste  | p [ps] 0.002                  | Ensemble          | npt v             |  |  |  |
| Atom Style  | atomic 🗸 🖌 🗸 atomic   | e Steps 5000                  | Temperature [K]   | 800               |  |  |  |
| Pair Style  | tersoff 🗸 V Total tim   | ie [ps]: 10                   | Pressure [bar]    | 1.013 1.013 1.013 |  |  |  |
| Potential File  | Si.tersoff 🗸 🗸 Gene   | rate Velocity                 | Pressure Control  | aniso             |  |  |  |
|   |   |                               | 🖌 Constrain Hydro | igen              |  |  |  |
| units<br>atom_style<br>boundary<br>box<br>read_data<br>pair_style<br>pair_coeff<br>neigh_modify<br>dump<br>dump<br>velocity<br>fix<br>fix<br>fix<br>thermo_style<br>thermo<br>timestep<br>run | <pre>writs metal<br/>atom_style atomic<br/>boundary p p p<br/>box tilt large<br/>read_data *DATAFILE*<br/>pair_style tersoff<br/>pair_coeff * * Si.tersoff *ATONTYPES*<br/>neigh_modify delay 0<br/>dump 1 all custom 100 *DUMPFILE* id type xs ys zs ix iy iz<br/>dump 2 all xtc 100 *XTCFILE*<br/>velocity all create 800 12345<br/>fix 1 all nomentum 50 linear 1 1 1<br/>variable gamma equal 1z*(pzz-0.5*(pxx+pyy))*100000/le10*le3<br/>thermo_style custom step time temp pe ke etotal enthalpy press vol density 1x 1y 1z pxx py<br/>thermo 10<br/>timestep 0.002<br/>run 5000</pre> |                               |                   |                   |  |  |  |
| OK  |   | Load                          | Save Save         | as Default Reset  |  |  |  |
|   | Copyright (C)   | 2018 X-Ability Co.,L          | td. All           |                   |  |  |  |

rights reserved.



#### Ⅱ. 系の平衡化

[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックし、保存する.dataファイルの名前を 指定すると計算が開始される。ここでは仮に「si333.data」とする。

| <u>M</u> D | 固体( <u>S</u> ) ツール( <u>T</u> ) | チュートリア | ענק <u>(U</u> | <u>)</u>   | へルプ( <u>H</u> ) |                |          |
|------------|--------------------------------|--------|---------------|------------|-----------------|----------------|----------|
|            | リモートジョブ投入                      |        |               |            |                 |                |          |
|            | 溶媒を配置/セルを構築                    |        |               |            |                 |                |          |
|            | 分子を挿入                          |        | PREC          | ISE        | GNORM=0.05      | NOINTER        | GRAPHE   |
|            | 水をイオンに置換                       |        | ar            |            |                 |                |          |
|            | 電荷を割り当て                        | •      |               |            |                 |                |          |
|            | Gromacs                        | •      |               |            |                 |                |          |
|            | LAMMPS                         | •      |               | <b>‡</b> - | -ワード設定          |                | 10       |
|            | Amber                          | •      |               | LA         | MMPS実行          |                | )0<br>)0 |
|            | MODYLAS                        | •      |               | トラ         | ジェクトリ読み         | 送 <del>み</del> | )6<br>17 |



### Ⅲ. 昇温計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Extending Simulation」に チェックを入れ、「# of Time Steps」に「50000」を入力し、「Generate Velocity」の チェックを外す。次に「Non-equilibrium (1)」タブで、「Enable Simulated Annealing」 にチェックを入れ、「Final Temperature」に「1200」を入力し、「OK」をクリックする。 次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。

| 30  |            |                                  |                       | - 🗆 🗙              |           |             |  |  |
|---|------------|----------------------------------|-----------------------|--------------------|-----------|-------------|--|--|
| Extending Simula  | ation      | Preset                           | NPT (fast)            | ✓ MPI              | 1         | processes   |  |  |
| Basic Advance Output Interction Non-equilibrium (1) Restraint Automatic Options Force Field |            |                                  |                       |                    |           |             |  |  |
| Units   | metal v    | <ul> <li>Time Step [</li> </ul>  | ps] 0.002             | Ensemble           | npt       | ~           |  |  |
| Atom Style  | atomic     | / # of Time S                    | iteps 50000           | perature [K]       | 800       |             |  |  |
| Pair Style  | tersoff    | <ul> <li>Total time [</li> </ul> | ps]: 100              | Pressure [bar]     | 1.013: 1. | 013: 1.013: |  |  |
| Potential File  | Si.tersoff | / General                        | e Velocity            | Pressure Contro    | aniso     | ~           |  |  |
| Constrain Hydrogen  |            |                                  |                       |                    |           |             |  |  |
| 80  |            |                                  | LAMMPS Setup          |                    |           |             |  |  |
| Extending Simulation Preset NPT (fast)  MPI 1 process                                       |            |                                  |                       |                    | processes |             |  |  |
| Basic Advance Output Interaction Non-equilibrium (1) Restraint Automatic ptions Force Field |            |                                  |                       |                    |           |             |  |  |
| Enable Elongation     Enable Simulated Annealing     hable Pulling                          |            |                                  |                       |                    |           |             |  |  |
| Affine Transform  | nation     | Final Tempe<br>[K]               | erature 1200          | d Atoms            | 1         | Set         |  |  |
| Eng. Strain Rate<br>[1/ps]  | 1e-4       | Annealing R                      | late [K/ps]: 4.0E+000 | Pull Velocity [A/f | 5] 0 0    | 0           |  |  |
|   | -          | Copyright                        | (C) 2018 X-Ability    | CoLtd. All         |           |             |  |  |



#### IV. 膨張係数の取得

[MD]-[LAMMPS]-[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。「Energy Terms」の「Temp」と「Lx」にチェックを入れ「Draw」ボタンを押す。 次に、「Excel」ボタンを押す。





#### IV. 膨張係数の取得

生成されるcsvファイルの2カラム目(温度)、3カラム目(X方向のシステムサイズ) を一次関数y=a\*x+bでフィッティングする。1000Kのときの膨張係数は、 a/(a\*1000+b)となる。下の例では6e-5 / (6e-5\*1000+16.217) = 3.7e-6 K<sup>-1</sup>となる。



Copyright (C) 2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.





Copyright (C) 2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.