

Winmostar チュートリアル

LAMMPS

伸長計算(固体)

V8.000

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、AI結晶の伸長計算の手順を示します。
- 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、伸長速度も結果に影響を与えます。

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

[cygwin_wm_v7_20160926.exe](#)(418MB) ※NWChem, Gromacs, Amber Windowsビルド済パッケージ
(上級者向け)NWChem, Gromacs, AmberのCygwin用インストール手順 ※cygwin_wm_v7_20160926.exe

[V6用NWChem](#) ※Windowsビルド済パッケージ

[GAMESSのインストール手順](#)

[LAMMPSのインストール手順](#)

[Quantum ESPRESSOのインストール手順](#)

Windows 版 LAMMPS インストールマニュアル 2016/06/13

1. LAMMPS の入手

① サイトにアクセスする。 <http://rpm.lammps.org/windows.html>

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 download area]をクリックする。

LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository

This repository is hosting pre-compiled Windows installers of the LAMMPS molecular dynamics simulation software package. The binaries are built semi-automatically with MinGW64 Linux to Windows cross compilers using up-to-date snapshots of the LAMMPS-ICMS git repository hosted at the Institute for Computational Molecular Sciences at Temple University. The LAMMPS binaries contain all optional packages included in the source distribution **except** KIM (license is not GPL compatible). USER_CUDA (CUDA does not support cross compilation), KOKOS and USER_INTEL (do not support cross-compilation with GCC), USER_HOARD (requires external library) PYHON (requires to bundle a full Python runtime), USER_GAMMA (only useful when linking to a GM software), USER_SJUE (requires external library), SGA2 (supported by the USER_SGA2G package which is included). The **serial** executable additionally does not contain the USER_4B package, which, from version 4.0.1 onwards, which are not available without additional...

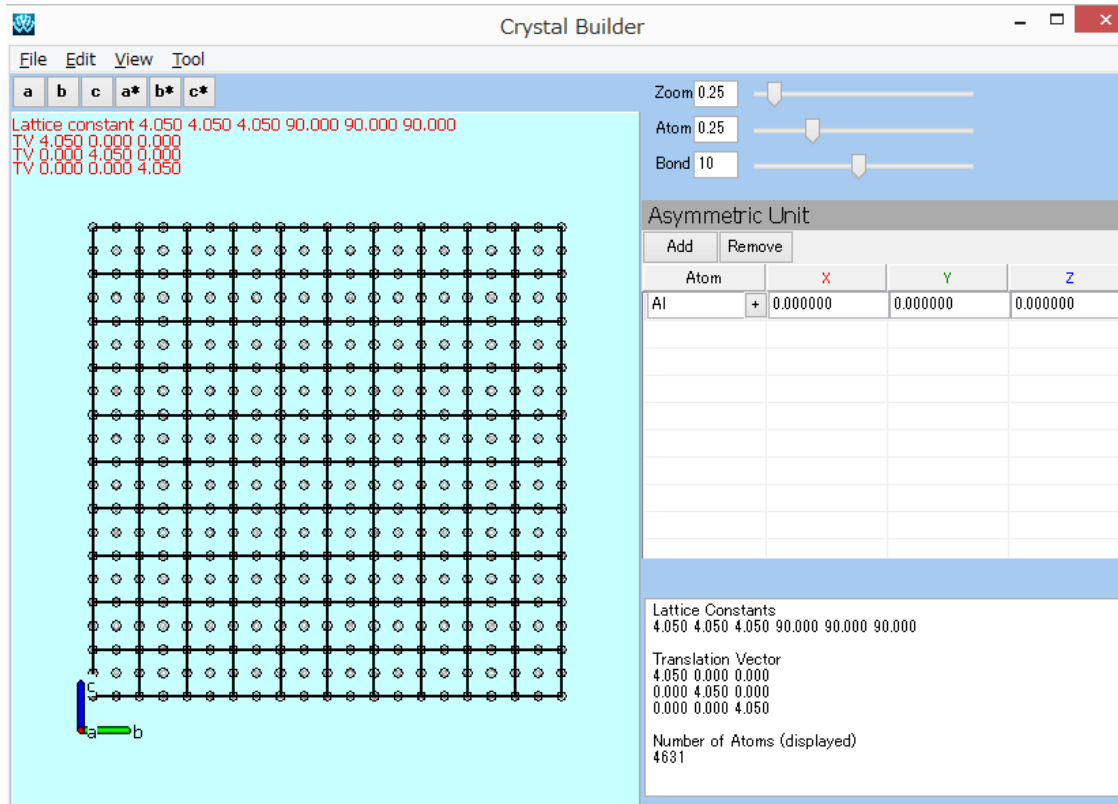


I. 系の作成

[固体]-[結晶ビルダ]を起動し、Cubic 225 Fm-3m、 $a=4.0495 \text{ \AA}$ 、 $(0.0, 0.0, 0.0)$ にAlが置かれた結晶を作成する。

次に、[Edit]-[Repeat]にて $10 \times 10 \times 10$ にスーパーセル展開する。

最後に[File]-[Save As]から「al101010.cif」として保存し、[File]-[Exit]をクリックする。



II. 系の平衡化

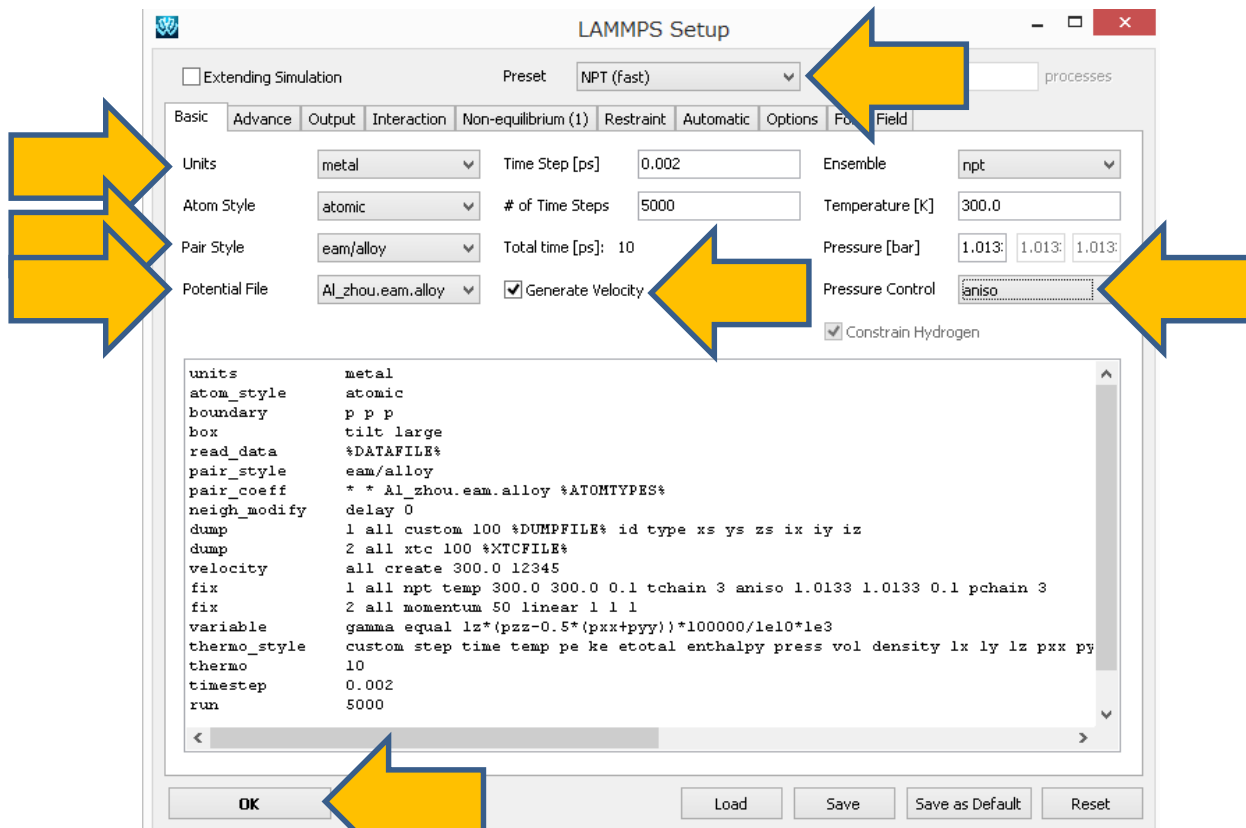
メイン画面の[ファイル]-[開く]から先ほどの「al101010.cif」を開く。次に、[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックする。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a molecular simulation setup with a grid of atoms. The menu is open over the 'MD' section, and the 'LAMMPS' option is selected. The sub-menu 'キーワード設定' (Keyword Settings) is highlighted, and a yellow arrow points to it from the right. A blue arrow points from the main window to the menu.

ID	Type	X	Y	Z	Mass	Charge	Group
3978	Al	2.86343	1	90.0000	1	180.0000	1397735783577
3979	Al	2.86343	1	90.0000	1	-125.2644	1358035793577
3980	Al	2.86343	1	90.0000	1	180.0000	1397935803579
3981	Al	2.86343	1	120.0000	1	-180.0000	1358035793577
3982	Al	2.86343	1	120.0000	1	-125.2644	1397935803579
3983	Al	2.86343	1	90.0000	1	-125.2644	1358435833581
3984	Al	2.86343	1	90.0000	1	180.0000	1398335843583
3985	Al	2.86343	1	120.0000	1	-180.0000	1358435833581
3986	Al	2.86343	1	120.0000	1	-125.2644	1398335843583
3987	Al	2.86343	1	90.0000	1	125.2644	1358835873190
3988	Al	2.86343	1	90.0000	1	180.0000	1398735883587
3989	Al	2.86343	1	120.0000	1	70.5288	1358835873190
3990	Al	2.86343	1	120.0000	1	-125.2644	1398735883587
3991	Al	2.86343	1	90.0000	1	-54.7356	1359235913590
3992	Al	2.86343	1	90.0000	1	180.0000	1399135923591
3993	Al	2.86343	1	120.0000	1	-103.4712	1359235913590
3994	Al	2.86343	1	120.0000	1	70.5288	1399335923591
3995	Al	2.86343	1	60.0000	1	-103.4712	1399439933592
3996	Al	2.86343	1	60.0000	1	180.0000	1399439933592
3997	Al	2.86343	1	90.0000	1	180.0000	1358835873190
3998	Al	2.86343	1	90.0000	1	180.0000	1399735883587
3999	Al	2.86343	1	120.0000	1	-125.2644	1358835873190

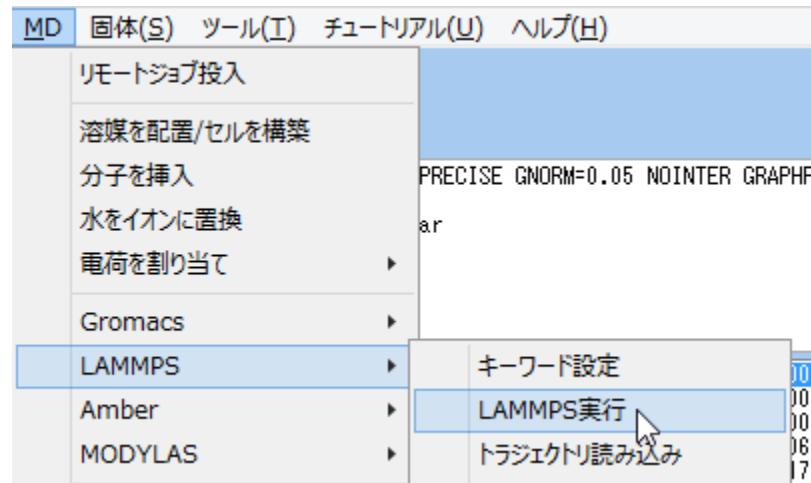
II. 系の平衡化

「Preset」に「NPT (fast)」、「Units」に「metal」、「Pair Style」に「eam/alloy」、「Potential File」に「Al_zhou.eam.alloy」、「Pressure Control」に「xyz」を指定し、「Generate Velocity」にチェックを入れ「OK」ボタンを押す。



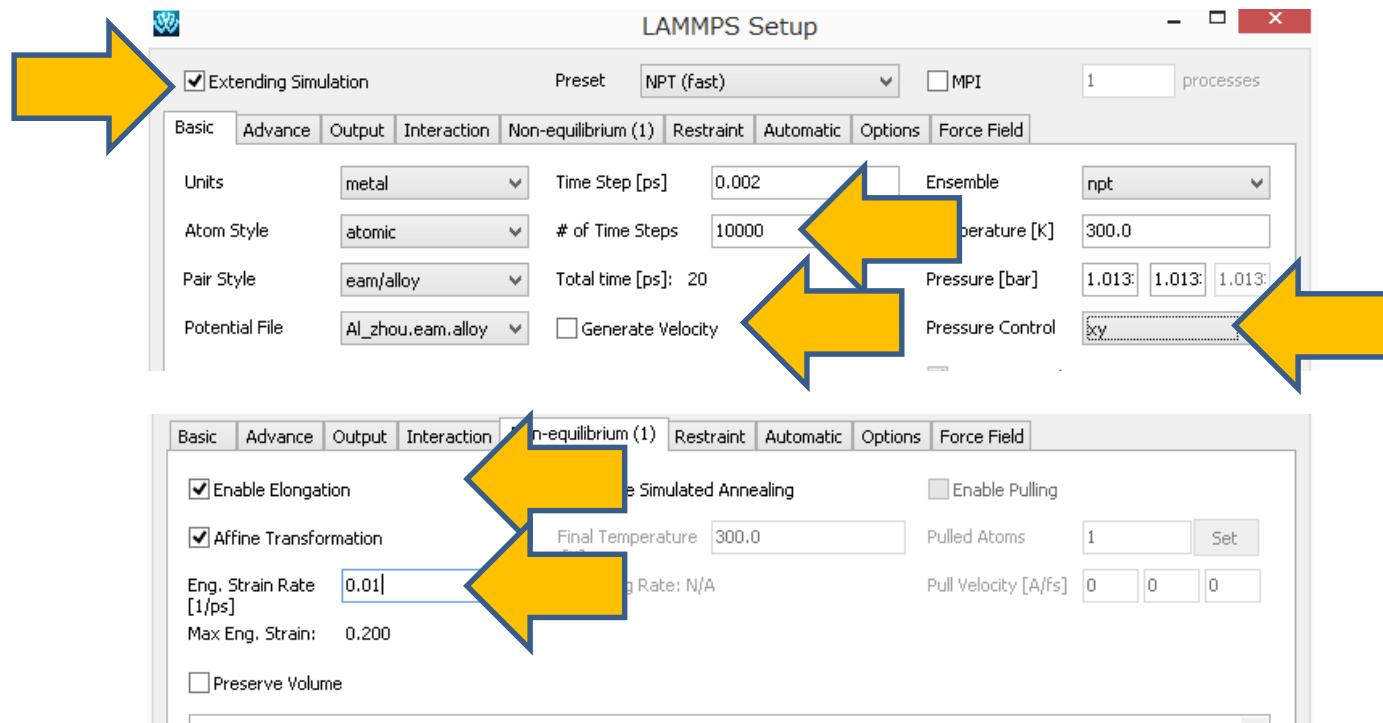
II. 系の平衡化

[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「al101010.data」とする。



III. 伸長計算

[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「10000」、「Pressure Control」に「xy」を指定し、「Generate Velocity」のチェックを外す。次に「Non-equilibrium (1)」タブで、「Enable Elongation」にチェックを入れ、「Eng. Strain Rate」に「0.01」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。



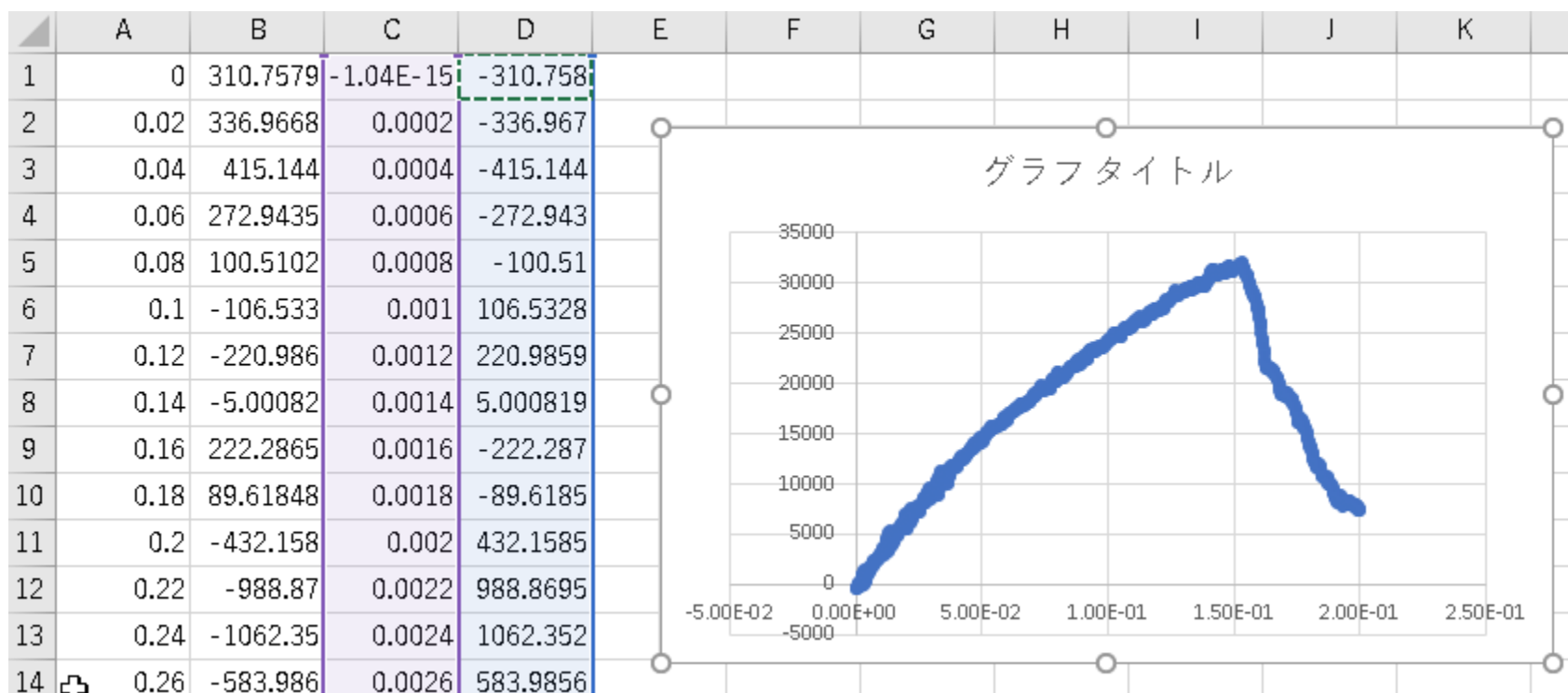
IV. 結果解析

[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「Pzz」と「EngStrai」にチェックを入れ「Draw」ボタンを押す。次に、「Excel」ボタンを押す。

The screenshot displays the 'Energy Plot' window in the X-Ability software. On the left, a menu is open with 'LAMMPS' selected, and 'エネルギー変化' (Energy Change) is highlighted. A blue arrow points from this menu to the 'Energy Terms' dialog box. In the dialog, 'EngStrai' is checked, and the 'Draw' button is highlighted with a yellow arrow. Below the dialog, the 'Excel' button is also highlighted with a yellow arrow. The 'Energy Plot' window shows a graph titled 'LAMMPS Energies' with the y-axis ranging from -40000 to 0 and the x-axis (Time in ps) ranging from 0 to 20. The graph shows two data series: 'Pzz' (black line) and 'EngStrai' (red line). The 'Pzz' series starts at 0, drops to a minimum of approximately -35000 at 15 ps, and then rises back towards 0. The 'EngStrai' series remains at 0 throughout the simulation.

IV. 結果解析

CSVを開き、x軸に3カラム目(工業ひずみ)、y軸(Pzz)に2カラム目に-1を掛けた数をプロットすると、S-S曲線が得られる。



IV. 結果解析

次に[MD]-[LAMMPS]-[トラジェクトリ読み込み]でデフォルトで選択されるdata, dump ファイルを開く。メイン画面で緑色のカメラを選択しz方向を横にとる。アニメーションを再生すると、欠陥が発生する様子が大雑把に確認できる。

The screenshot illustrates the workflow for loading trajectory data into the simulation. On the left, the 'MD' menu is open, showing the path: MD > LAMMPS > トラジェクトリ読み込み. A yellow arrow points from this menu item to the central 3D simulation window. The simulation window displays a dense packing of atoms, with a yellow arrow pointing to a green camera icon in the toolbar. A blue arrow points from the simulation window to the right-hand control panel. In this panel, the 'Timestep' list shows values from 7700 to 10000, with 'Timestep 10000' highlighted. A yellow arrow points from this timestep to the 'gro' button, which is used to load the trajectory data.

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

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

👍 いいね!