

Winmostar™ チュートリアル  
LAMMPS  
膨張係数計算  
V9.0.1

株式会社クロスアビリティ

2019年2月8日

## 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。
- フィットting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。

# 動作環境設定

本機能を用いるためには、LAMMPSとCygwinのセットアップが必要です。

- [https://winmostar.com/jp/download\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/download_jp.html)のインストール方法のWindows用のLAMMPSとCygwinの設定手順に従います。

(6) Windows上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。

[GAMESS](#) [NWChem](#) [LAMMPS](#) [NAMD](#) [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

※ Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは(7)でインストールするcygwin\_wmに含まれます。

(7) MDまたはSolidバックの計算(およびその他の一部の処理)を実行する場合は、以下のいずれかのリンク先の手順でCygwinの環境を構築します。

[ビルド済みのcygwin\\_wmをインストールする場合\(推奨\)](#)

[cygwin\\_wmをビルドする場合\(非推奨、上級者向け\)](#)

[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合\(ベータ版\)](#)

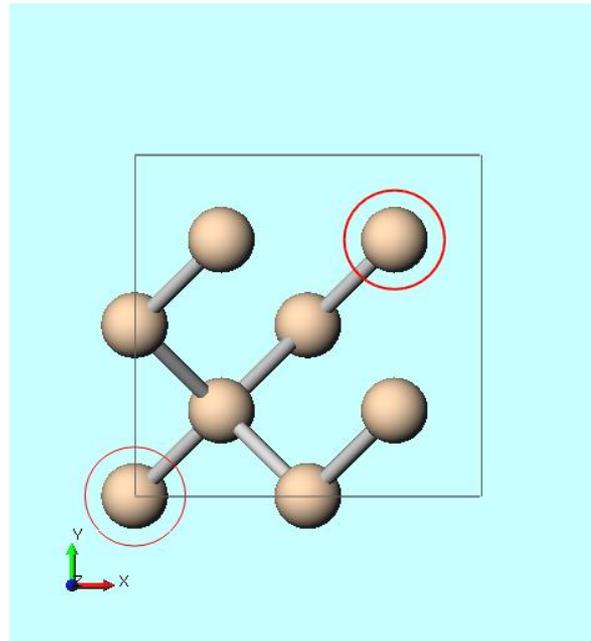
# 1. 固相の作成

本チュートリアルでは、シリコンの融点を計算する。

1. ファイルを開くをクリックする。
2. サンプルフォルダ内の**si.cif**を開く。  
(デフォルトではC:\winmos9\samples\si.cif)

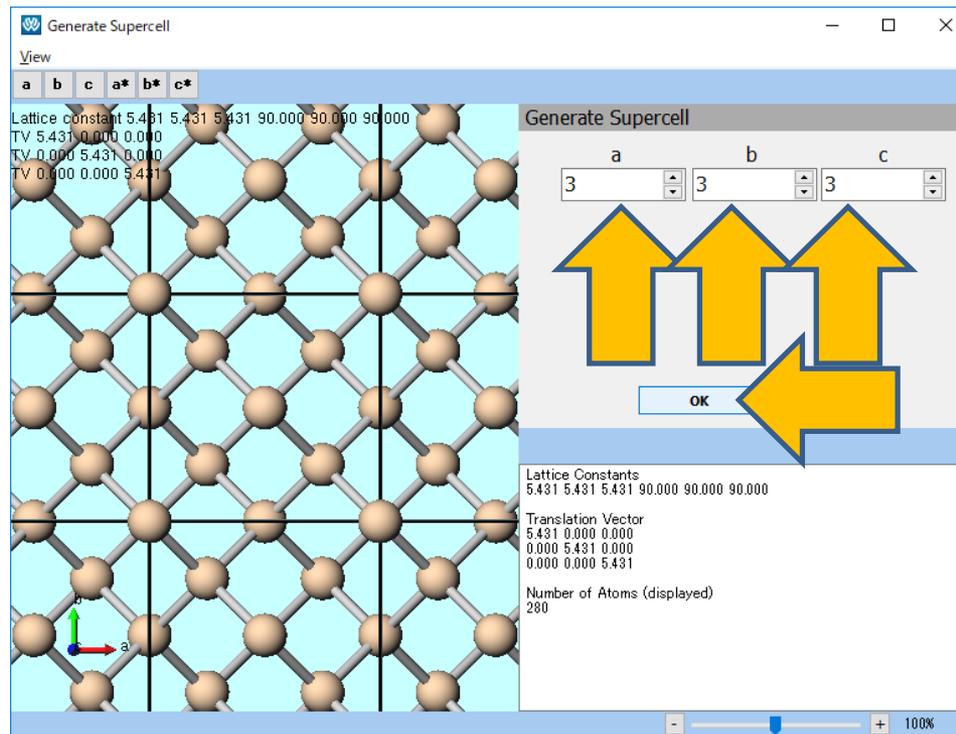
あるいは以下の設定を用いて、結晶ビルダ上でSi結晶を作成する。

Crystal system : Cubic  
Space group : Fd-3m (227)  
Lattice constants : a=5.4309 Å  
Asymmetric unit : Si (0.0 0.0 0.0)



# I. 固相の作成

1. 固体 | スーパーセルを作成をクリックする。
2. 3 x 3 x 3のセルを作成する。
3. OKをクリックする。



## II. 系の平衡化

1. ソルバー一覧から**LAMMPS**を選択し、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Preset**に**NPT (fast)**を選択する。
3. 以下のように設定する。

**Units**に**metal**

**Pair Style**に**tersoff**

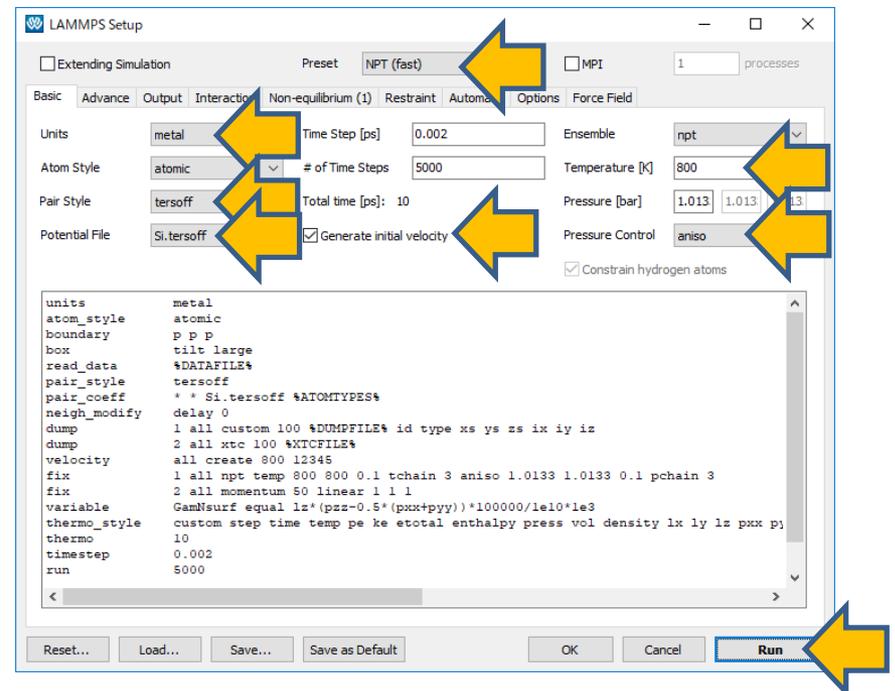
**Potential File**に**Si.tersoff**

**Generate initial velocity**をチェック

**Temperature**に**800**

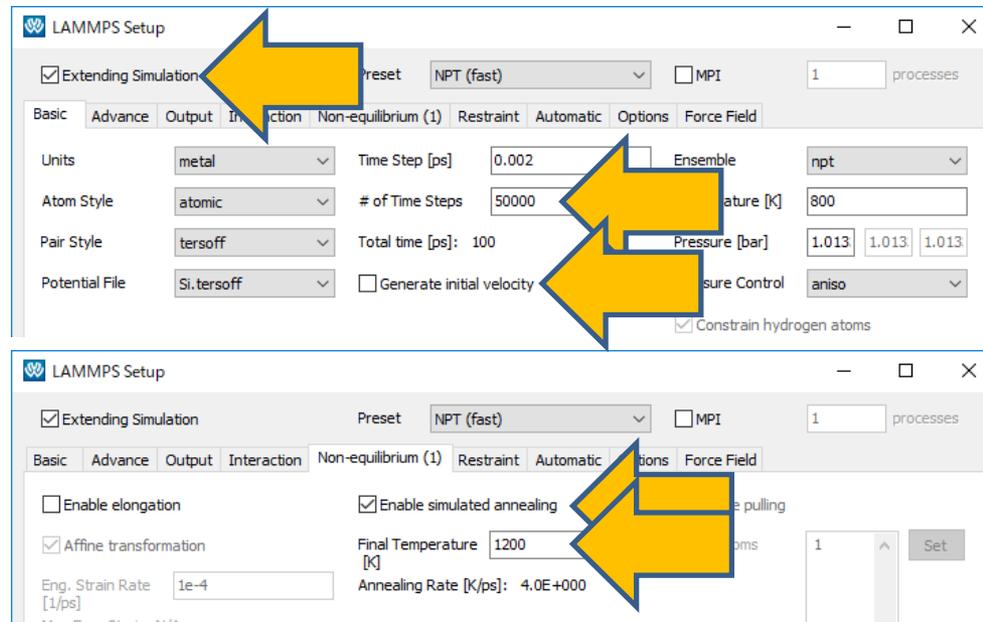
**Pressure Control**に**aniso**

4. **Run**をクリックし、ファイル名を**si333.data**として保存する。



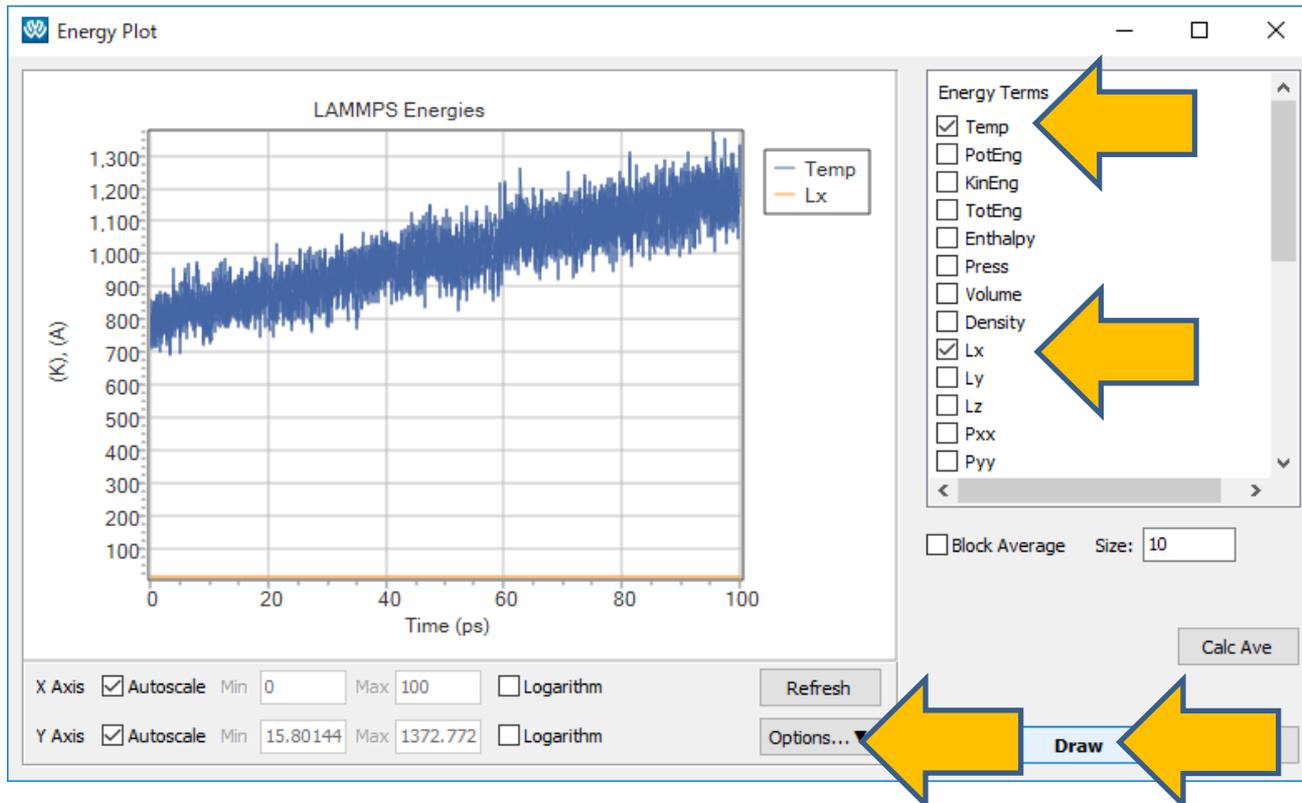
## III. 昇温計算

1.  (キーワード設定)をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れる。
3. **Basic**タブにて、**# of Time Steps**に**50000**を入力し、**Generate initial velocity**のチェックを外す。
4. **Non-equilibrium (1)**タブにて、**Enable Simulated Annealing**にチェックを入れ、**Final Temperature**に**1200**を入力する。
5. **Run**をクリックする。



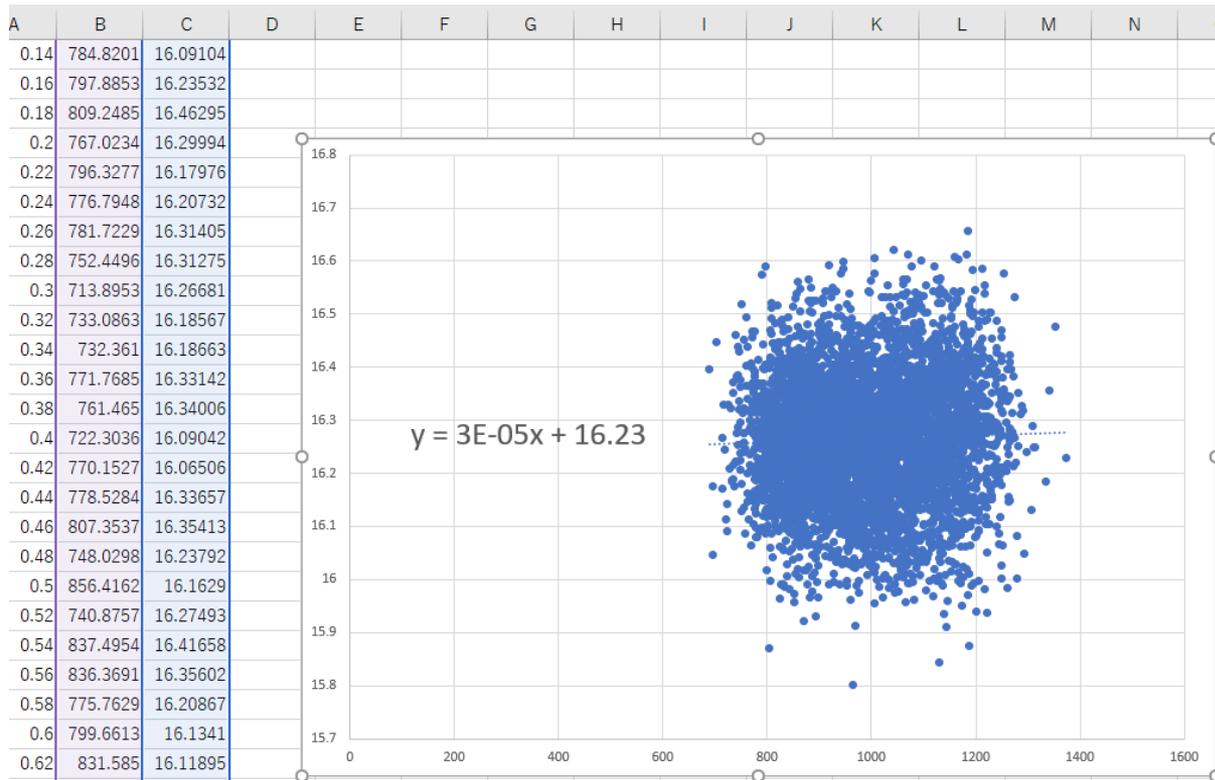
## IV. 膨張係数の取得

1.  (エネルギー変化)をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるファイルを開く。
3. **Energy Terms**の**Temp**と**Lx**にチェックを入れ、**Draw**をクリックする。
4. **Options | Open Excel**をクリックする。



## 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 $6e-5 / (6e-5*1000+16.217) = 1.8e-6 \text{ K}^{-1}$ となる。



<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友

アカウント登録 ログイン

**X-Ability**  
クロスアビリティ

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! 138件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ユーザー投稿

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\\_au\\_detailpage\\_o00\\_s00...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_au_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