

Winmostar™ チュートリアル  
LAMMPS  
伸長計算(固体)  
V9.0.1

株式会社クロスアビリティ

2019年2月6日

# 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。

# 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。

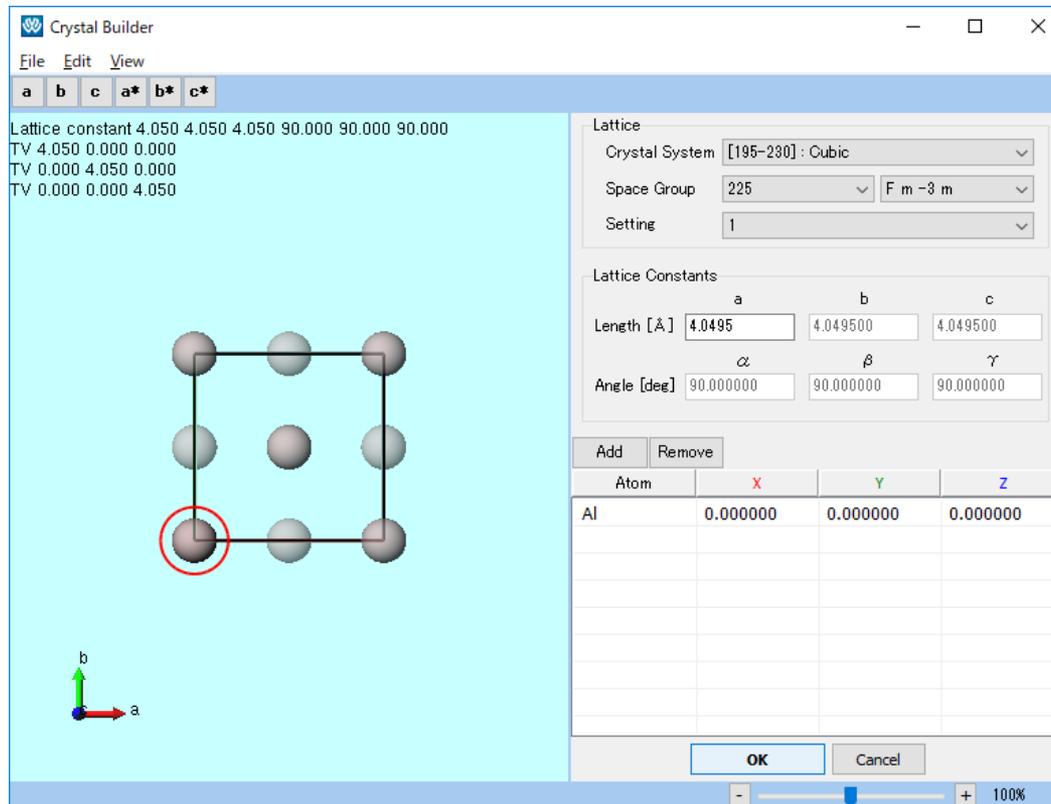
[ビルド済みのcygwin\\_wmをインストールする場合（推奨）](#)

[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）](#)

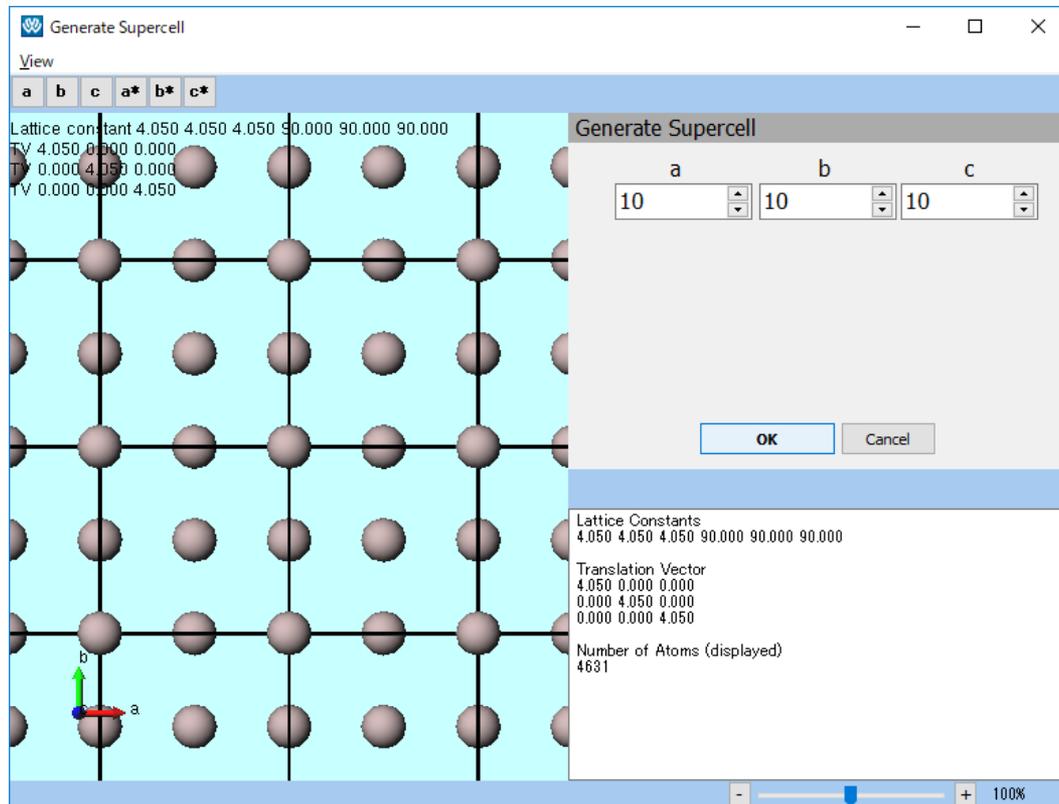
# I. 系の作成

1. 固体 | 結晶ビルダをクリックする。
2. 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。
3. OKをクリックする。



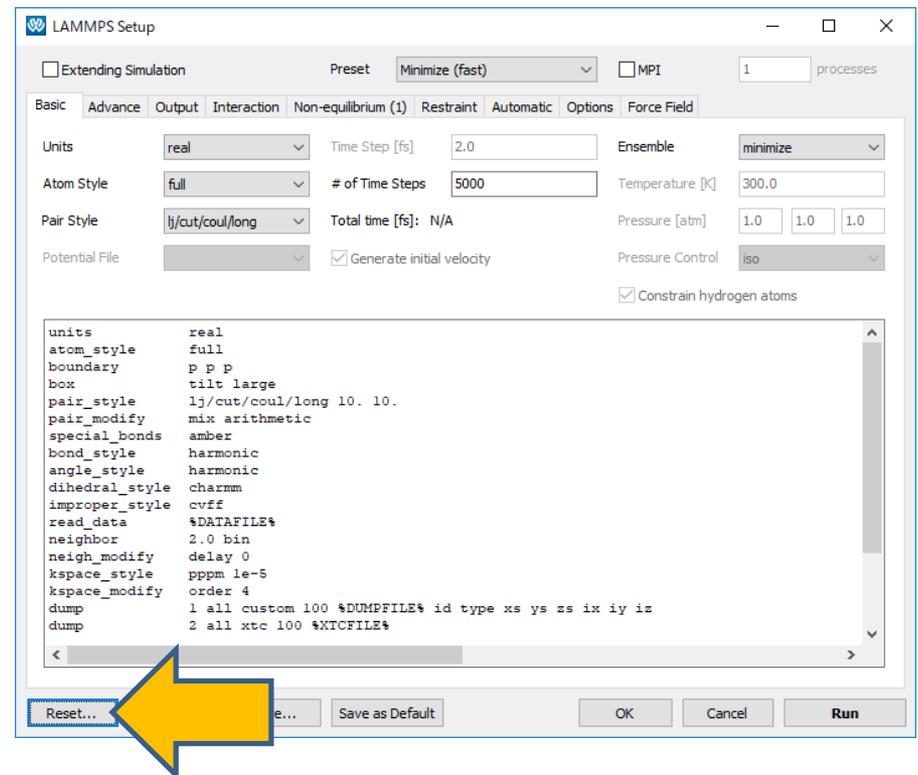
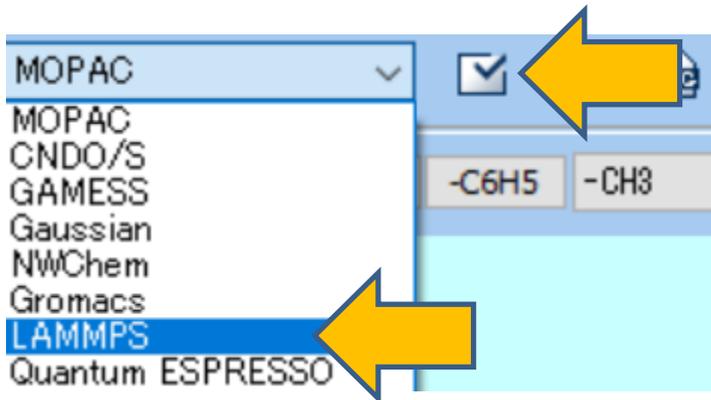
# I. 系の作成

1. 固体 | スーパーセルを作成...をクリックする。
2. 10×10×10のスーパーセルを作成し、OKをクリックする。



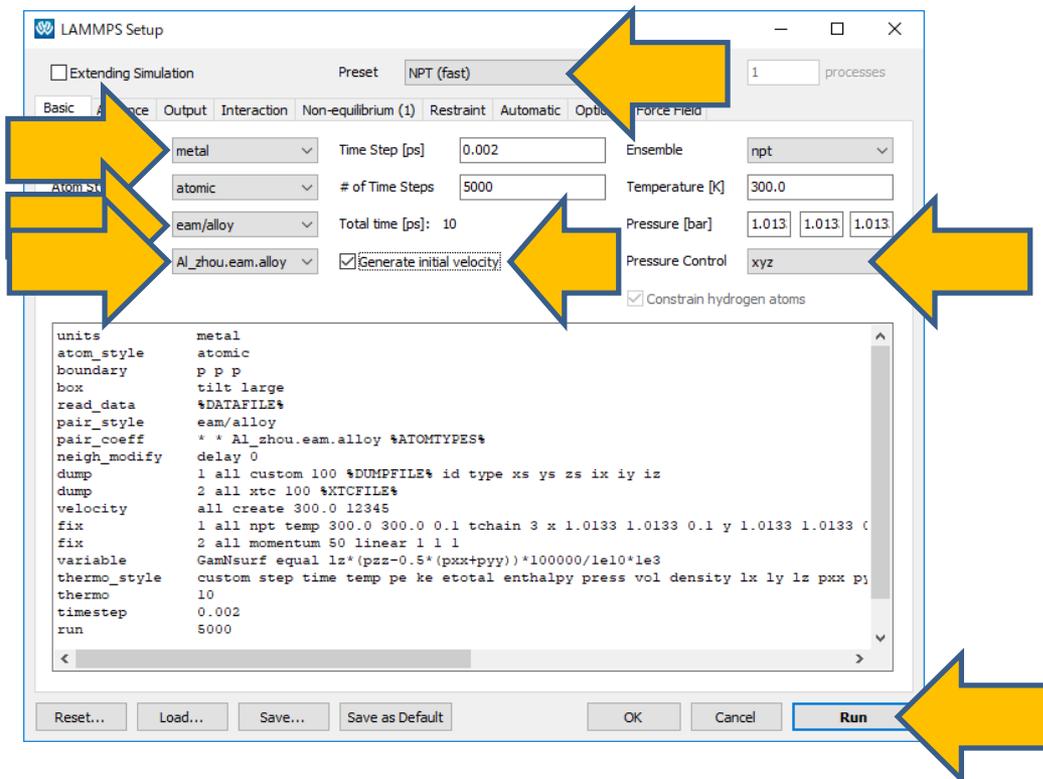
## II. 系の平衡化

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. **Reset**をクリックする。



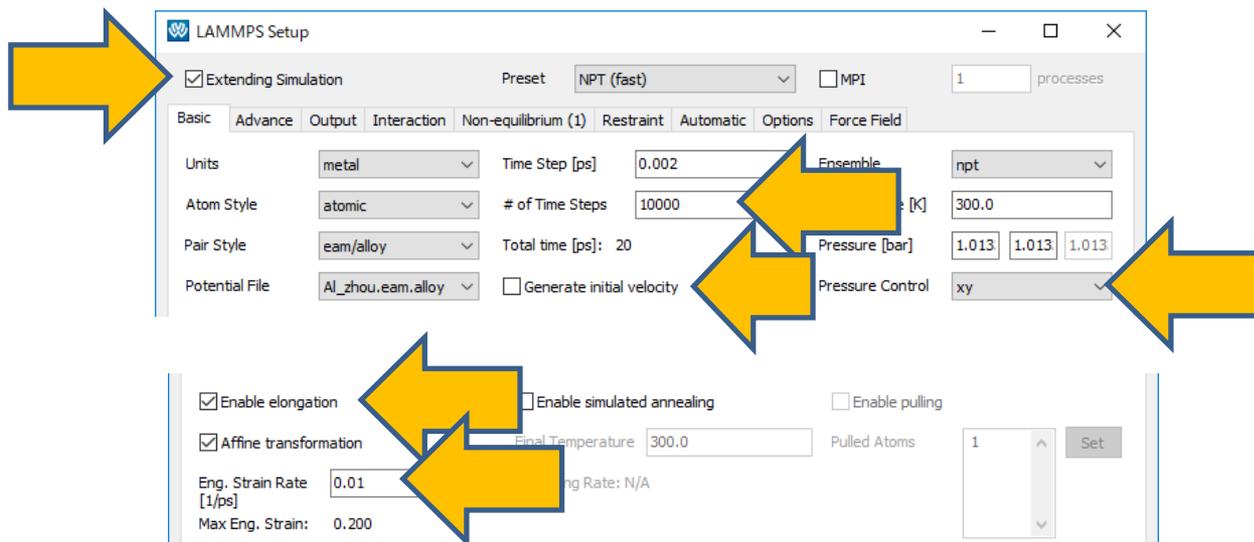
## II. 系の平衡化

1. PresetにNPT (fast)を選択する。
2. Unitsにmetal、Pair Styleにeam/alloy、Potential FileにAl\_zhou.eam.alloy、Pressure Controlにxyzを指定し、Generate initial velocityにチェックを入れる。
3. Runをクリックする。ファイル名をal101010.dataとして保存する。



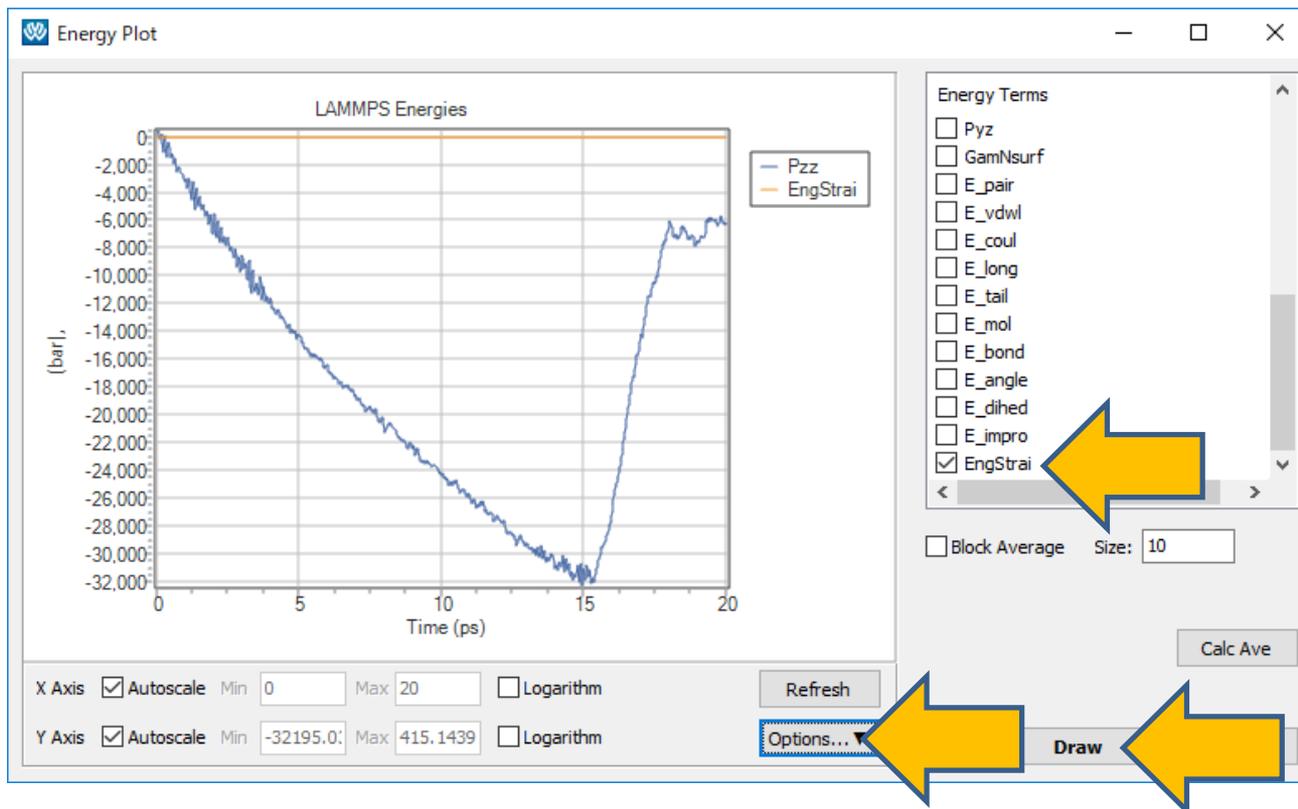
### III. 伸長計算

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、# of Time Stepsに10000、Pressure Controlにxyを指定し、Generate initial velocityのチェックを外す。
3. Non-equilibrium (1)タブで、Enable elongationにチェックを入れ、Eng. Strain Rateに0.01を入力する。
4. Runをクリックする。



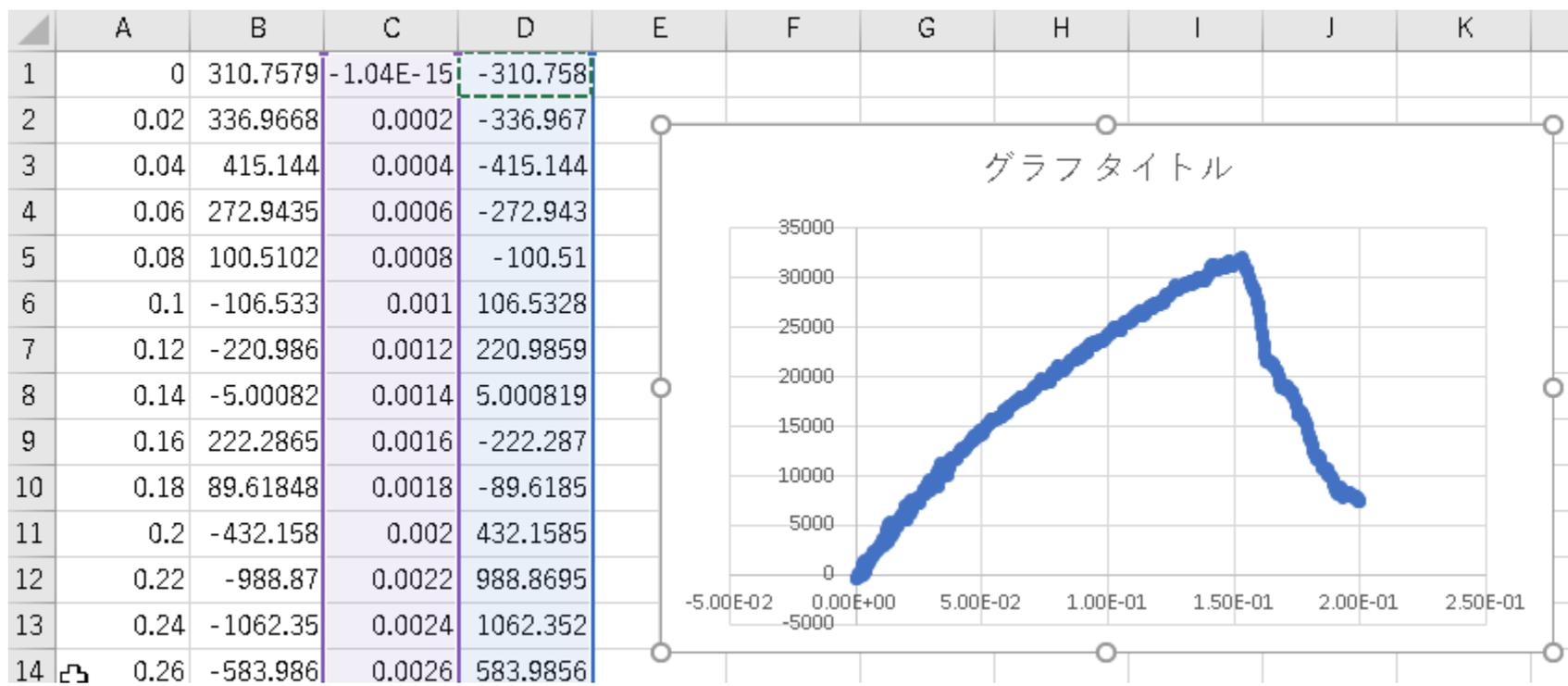
## IV. 結果解析

1.  (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。
2. Energy TermsのPzzとEngStraiにチェックを入れ、Drawボタンを押す。
3. Options | Open Excelをクリックする。



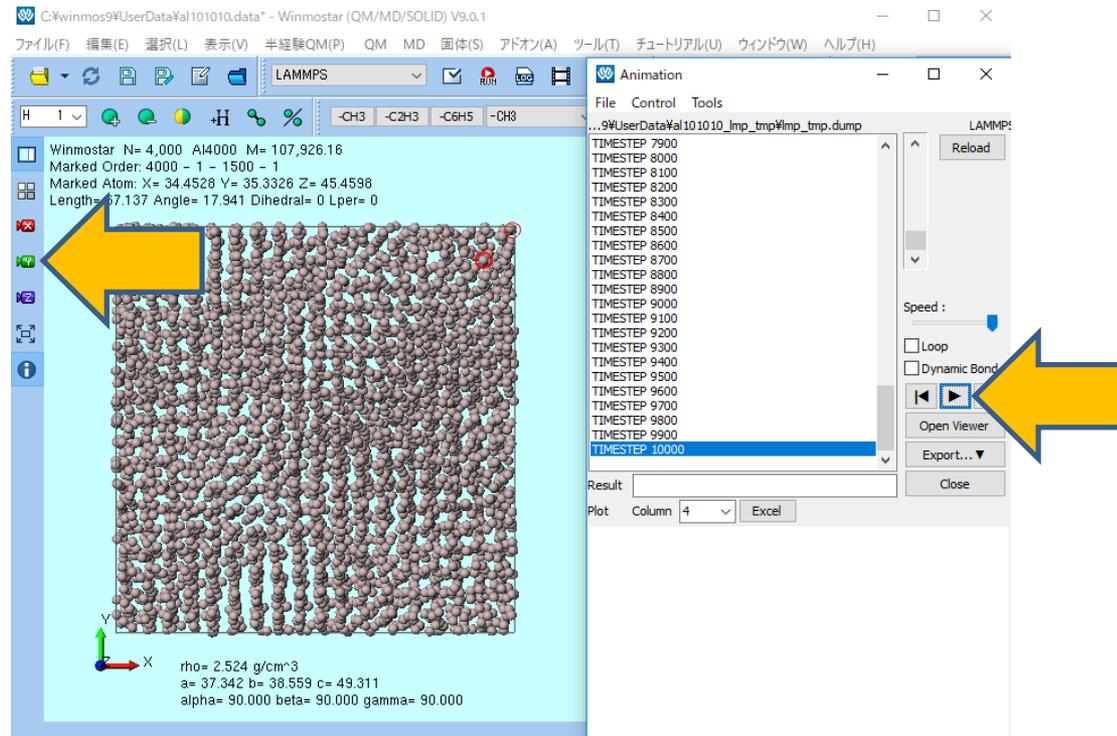
## IV. 結果解析

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

1.  (トラジェクトリ読み込み) をクリックし、  
デフォルトで選択されるdata, dumpファイルを開く。
2.  (Y軸方向から表示) をクリックする。
3.  (再生) すると、欠陥が発生する様子が大雑把に確認できる。



<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! 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 · 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