

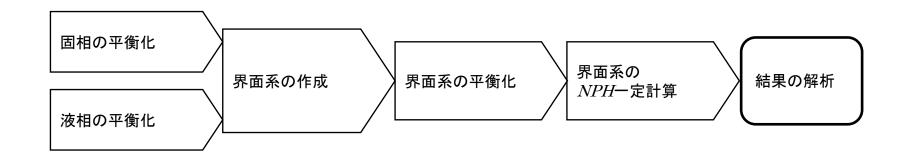
# Winmostar<sup>TM</sup> チュートリアル LAMMPS 融点計算

株式会社クロスアビリティ 2019年4月30日



#### 概要

Si結晶の1 atmにおける融点を、固液界面系のNPH一定計算から算出する。



#### 注意点:

- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は本例と異なる場合はあります。
- 相互作用計算方法や力場も計算結果に大きく影響します。
- システムサイズ(固相のリピート数)、初期温度、接触面の違いも結果に影響 を与えます。



# 動作環境設定

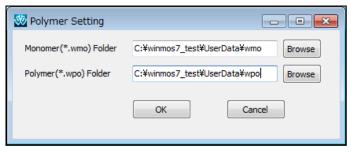
#### 本機能を用いるためには、LAMMPSとCygwinのセットアップが必要です。

• <a href="https://winmostar.com/jp/download\_jp.html">https://winmostar.com/jp/download\_jp.html</a>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パックの計算(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)
```

ポリマーツールの設定
 [MD]->[ポリマー]->[設定](下図)で、必要に応じてモノマーファイル(拡張子.wmo)とポリマーファイル(拡張子.wpo)の格納フォルダを指定する。





# I. 固相の作成

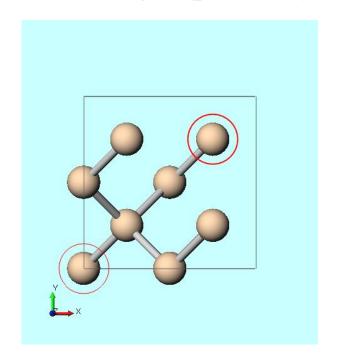
本チュートリアルでは、シリコンの融点を計算する。

- 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:\footnote{off} winmos 9\footnote{off} samples \footnote{off} 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

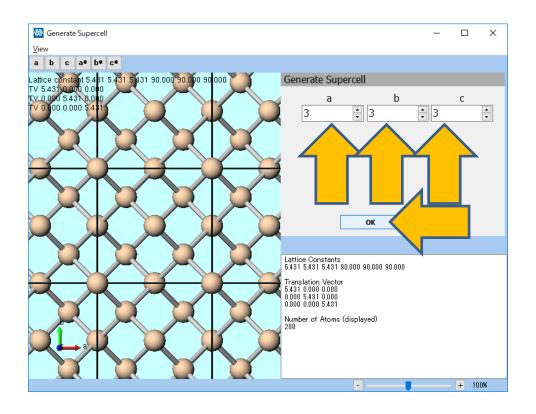
Space group: Fd-3m (227) Lattice constants: a=5.4309 Å Asymmetric unit: Si (0.0 0.0 0.0)





# I. 固相の作成

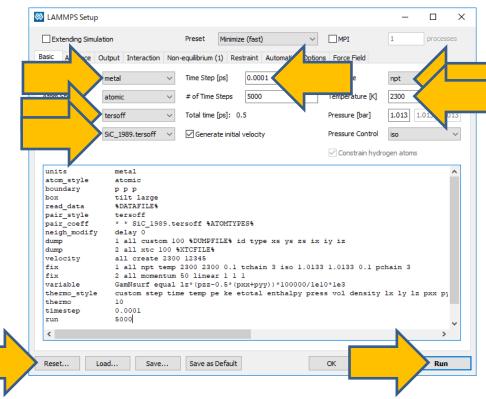
- 1. **固体 | スーパーセルを作成**をクリックする。
- 2. **3 × 3 × 3**のセルを作成する。
- 3. **OK**をクリックする。





# Ⅱ. 固相の平衡化

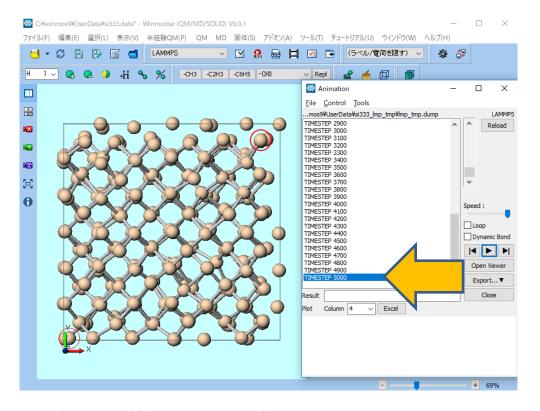
- ソルバー覧からLAMMPSを選択し、
   (キーワード設定)を開く。
- 2. Resetをクリックする。
- 3. 下記のように設定する。
  Unitsをmetal
  Pair Styleをtersoff
  Potential FileをSiC\_1989,tersoff
  Ensembleをnpt
  Time Stepを0.0001
  Temperatureを2300
- 4. Runをクリックする。 si333solid.dataとして保存する。





## Ⅱ. 固相の平衡化

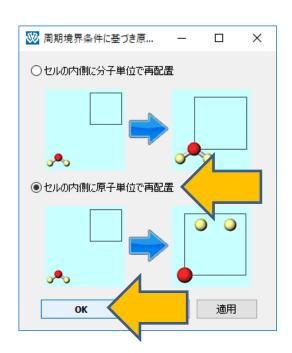
- 1. 計算終了後、**口**(トラジェクトリ読み込み)をクリックし、 デフォルトで選ばれるdataとdumpファイルを開く。
- 2. 開いたAnimationウインドウで最終構造を選択して表示する。
- 3. Animationウインドウを閉じる。

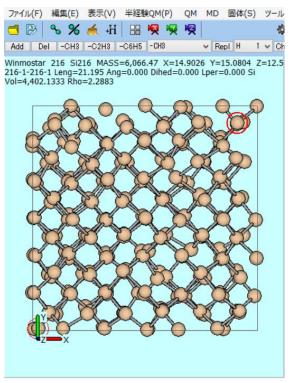




#### Ⅱ. 固相の平衡化

- 1. 編集 周期境界条件に基づき原子を再配置をクリックする。
- 2. セルの内側に原子単位で再配置を選択し、OKをクリックする。
- 3. **表示 | 周期境界の表現形式**をクリックする。
- 4. セルの内側に原子単位で再配置を選択し、OKをクリックする。
- 5. ② (名前を付けて保存)にてsi\_solid.cifとして保存する。

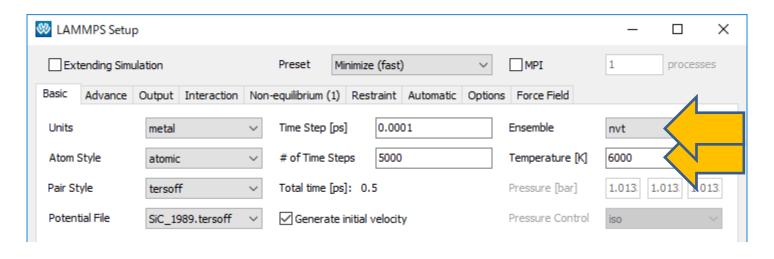






#### Ⅲ. 液相の平衡化

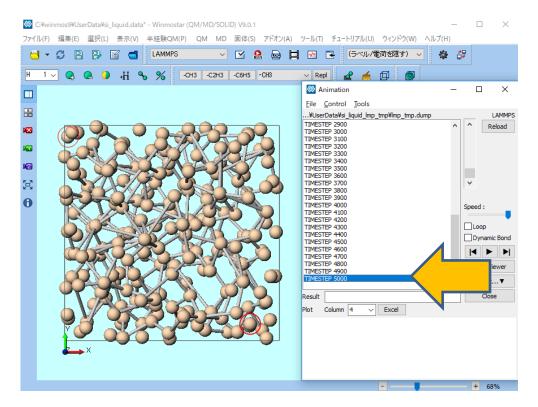
- 1. 🗹 (キーワード設定)をクリックする。
- 2. Ensembleをnvt、Temperatureを6000に設定する。
- 3. Runをクリックし、「計算を開始する前に保存しますか?…」と聞かれたら**はい**を クリックする。保存時のファイル名はsi\_liquid.dataとする。





# Ⅲ. 液相の平衡化

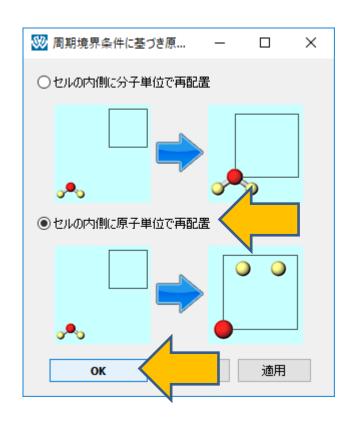
- 1. 計算終了後、**口**(トラジェクトリ読み込み)をクリックし、 デフォルトで選ばれるdataとdumpファイルを開く。
- 2. 開いたAnimation**ウインドウ**で最終構造を選択して表示する。
- 3. Animationウインドウを閉じる。

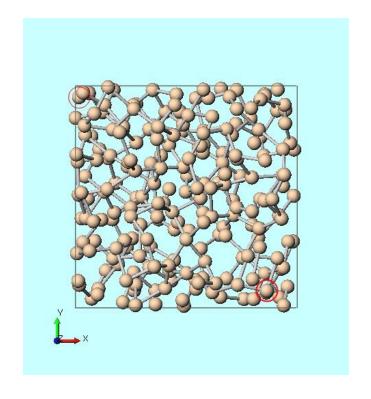




## Ⅲ. 液相の平衡化

- 1. 編集 周期に基づき原子を再配置をクリックする。
- 2. セルの内側に原子単位で再配置を選択し、OKをクリックする。
- 3. ② (名前を付けて保存)にてsi\_liquid.cifとして保存する。

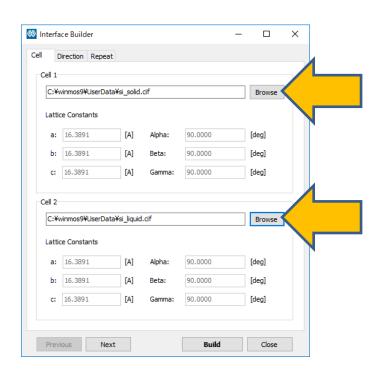


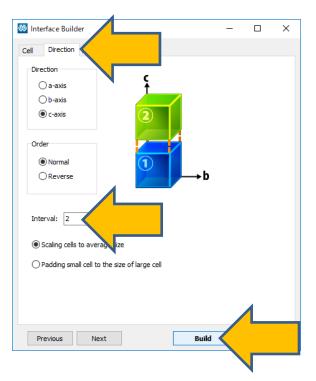




# Ⅳ. 固液界面系の作成

- 1. **MD | 界面ビルダ**をクリックする。
- 2. Cell 1のBrowseをクリックし、si\_solid.cifを選択する。
- 3. Cell 2のBrowseをクリックし、si\_liquid.cifを選択する。
- 4. DirectionタブのIntervalを2に設定し、Buildをクリックする。

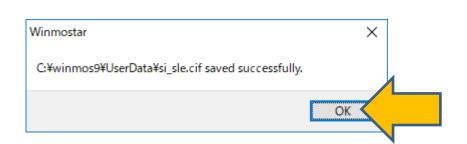


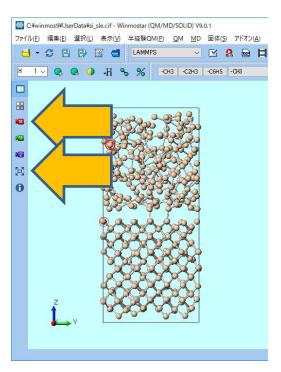




# Ⅳ. 固液界面系の作成

- 1. ファイル名はsi\_sle.cifとし保存する。
- 2. 以下のようなウインドウが現れるのでOKを押す。
- 3. Interface BuilderウインドウのCloseをクリックする。
- 4. **図** (X軸方向から表示) をクリックする。
- 5. **(ウィンドウサイズに合わせる**)をクリックする。

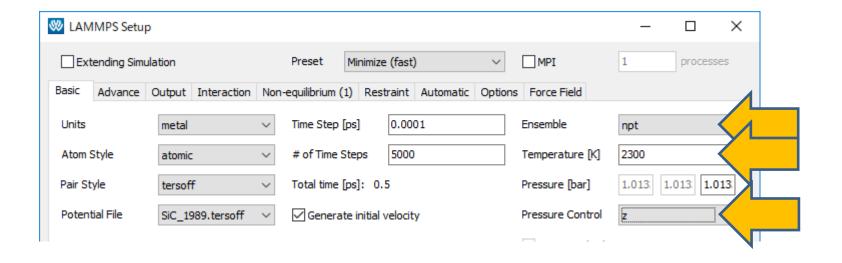






## V. 界面系の平衡化

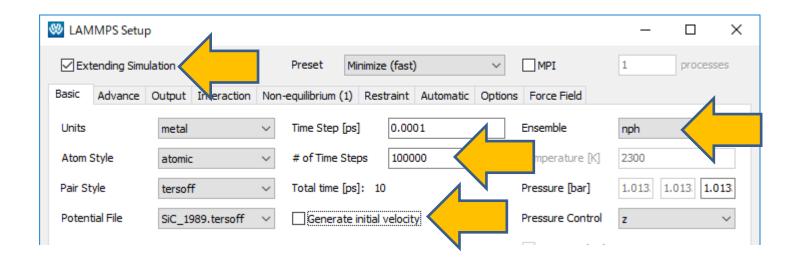
- 1. 🗹 (キーワード設定)を開き、
- 2. Ensembleをnpt、Temperatureを2300、Pressure Controlをzに設定する。
- 3. Runをクリックする。ファイル名はsi\_sle.dataとする。





#### VI. 融点の算出

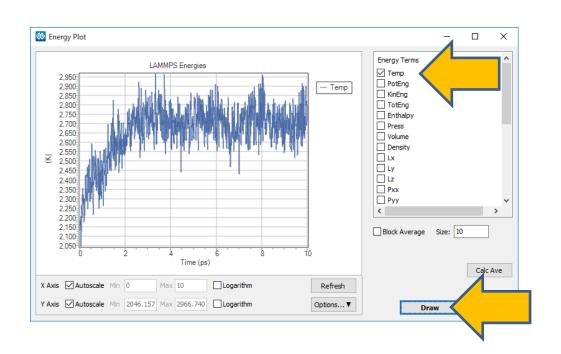
- 1. 🗹 (キーワード設定)をクリックする。
- 2. Extending Simulationをチェックし、# of Time Stepsを100000、 Ensembleをnphに設定し、Generate initial velocityのチェックを外す。
- 3. **Run**をクリックする。





## VI. 融点の算出

- 計算終了後、
   (エネルギー変化)をクリックし、 デフォルトで選ばれるログファイルを開く。
- 2. Tempにチェックを入れDrawボタンを押すと温度変化が表示される。



この時の最終温度と平衡化時の 温度が一致する場合、その温度を 融点とみなせる。(参考文献)

ここでの最終温度は2700 K付近であった。一方で平衡化時の温度は2300 K(p16を参照)であった。つまり、この温度は融点ではない。最終温度(ここでは2700 K)を平衡化時の温度として採用し、再度II.からVI.までの手順を繰り返す必要がある。

参考文献: S. Yoo, X. C. Zeng and J. R. Morris, J. Chem. Phys., 120, 3, (2004), 1654-1656.



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



Copyright (C) 2019 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.