X-Ability
クロスアビリティ

Winmostar チュートリアル

LAMMPS

膨張係数計算

V8.000

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/01

X-Ability
クロスアビリティ

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。

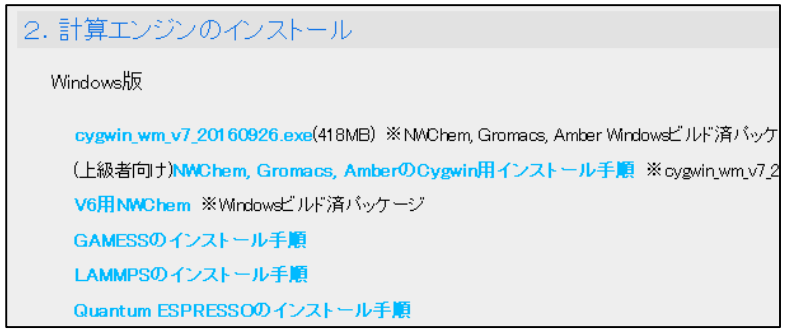
- ターゲットとなる物質の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- 相互作用の計算方法、力場の種類、スーパーセルのサイズ、昇温速度も結果に影響を与えます。
- フィッティングは各種のグラフソフトや解析ソフトで実施することをお勧めします。

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

X-Ability
クロスアビリティ

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



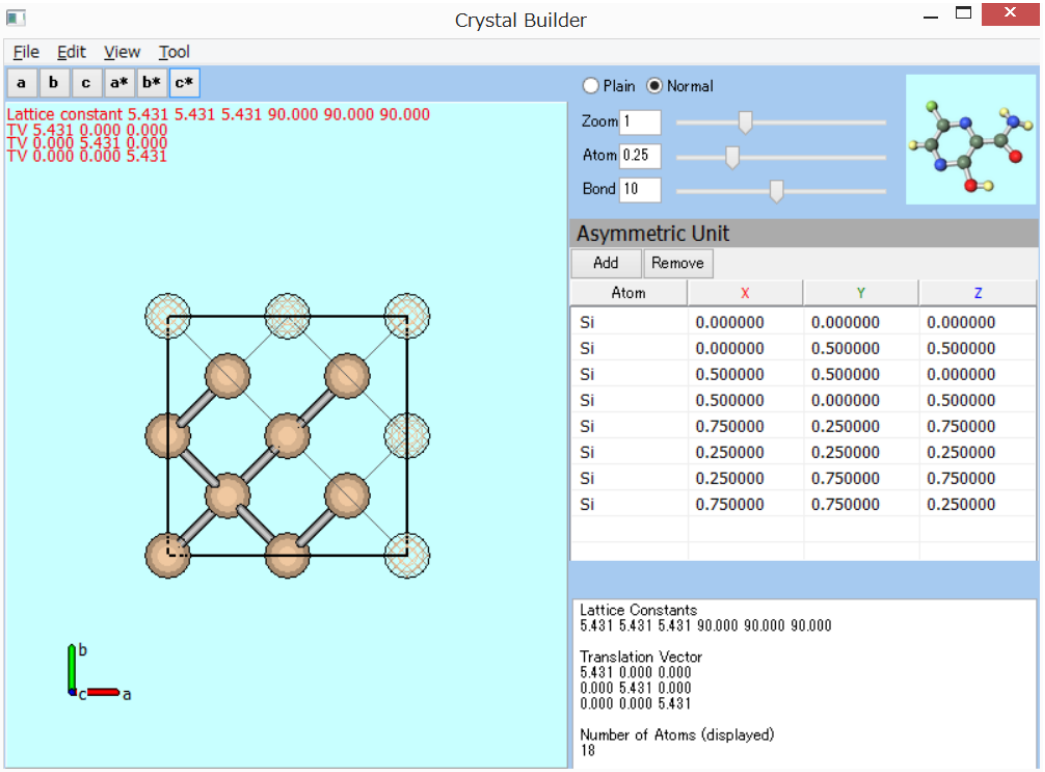
Copyright (C) 2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.

X-Ability
クロスアビリティ

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

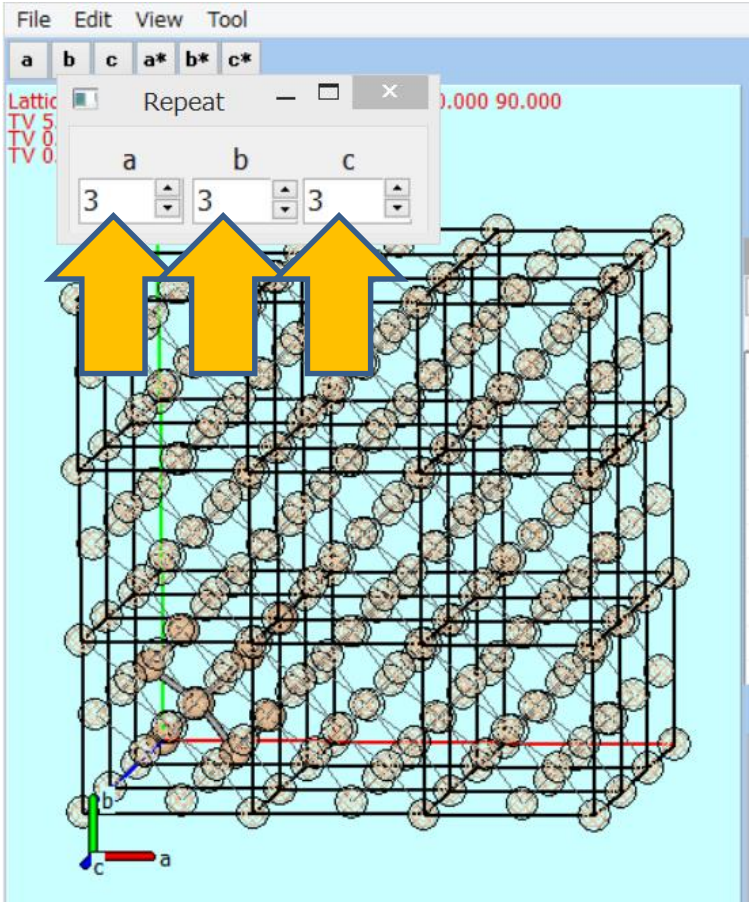


Copyright (C) 2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.

X-Ability
クロスアビリティ

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。

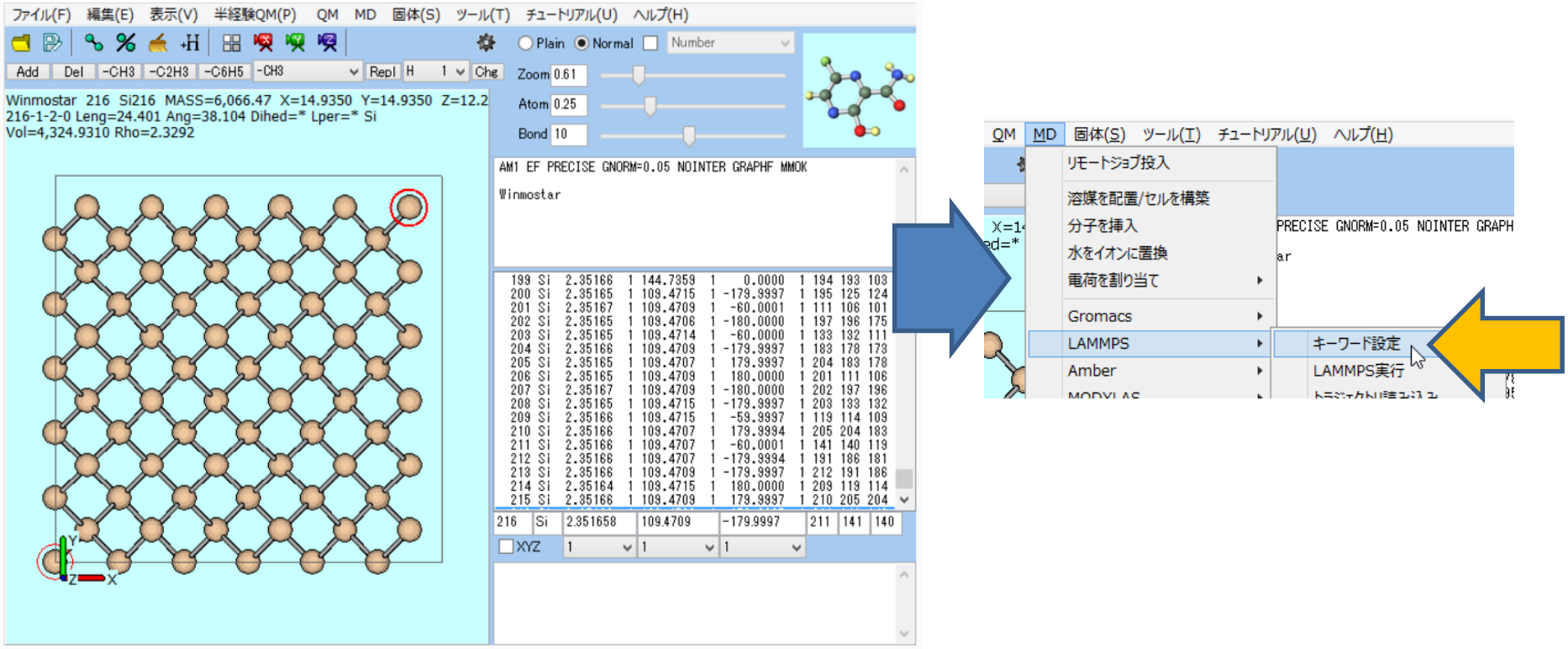


Copyright (C) 2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.

X-Ability
クロスアビリティ

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。

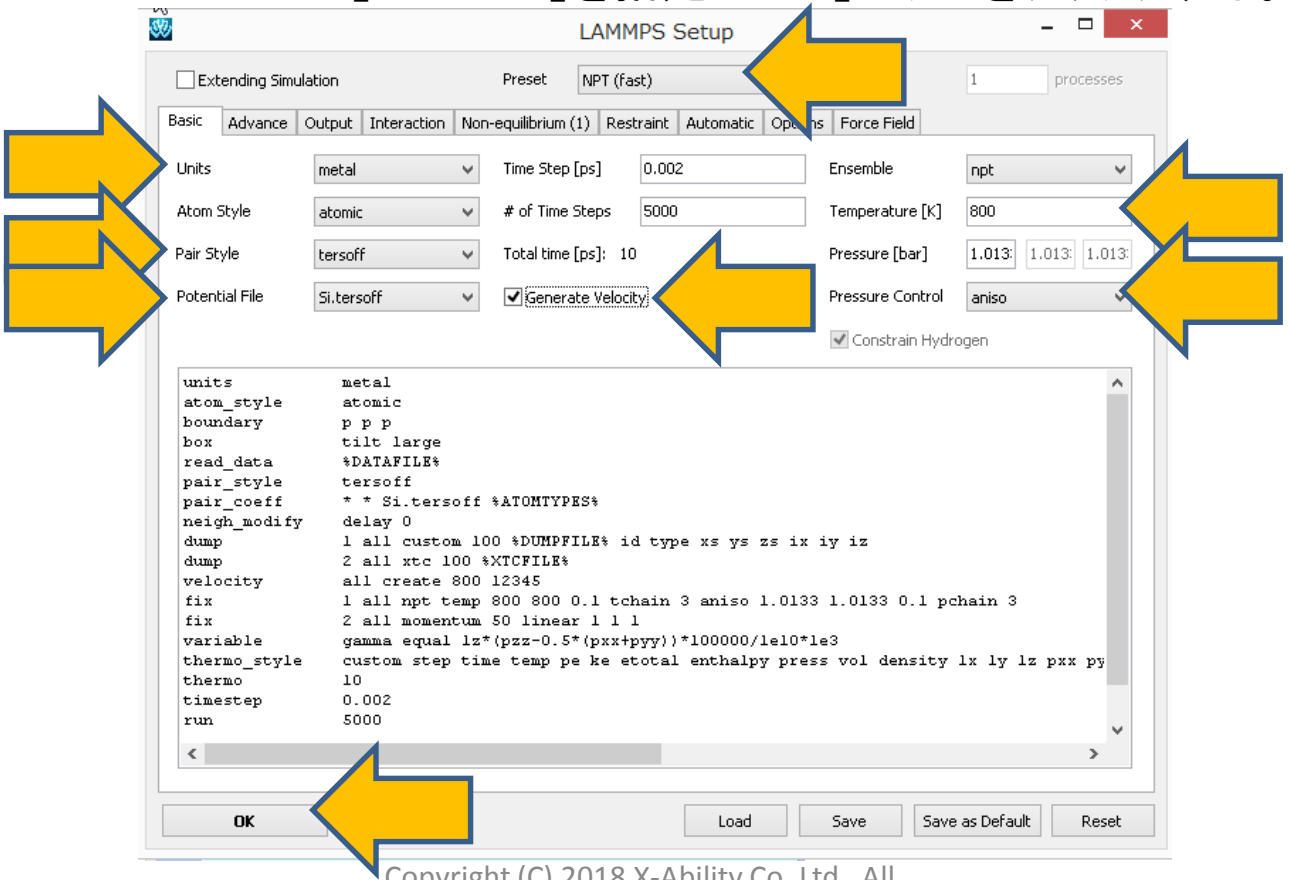


Copyright (C) 2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.

X-Ability
クロスアビリティ

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。



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

X-Ability
クロスアビリティ

II.　系の平衡化

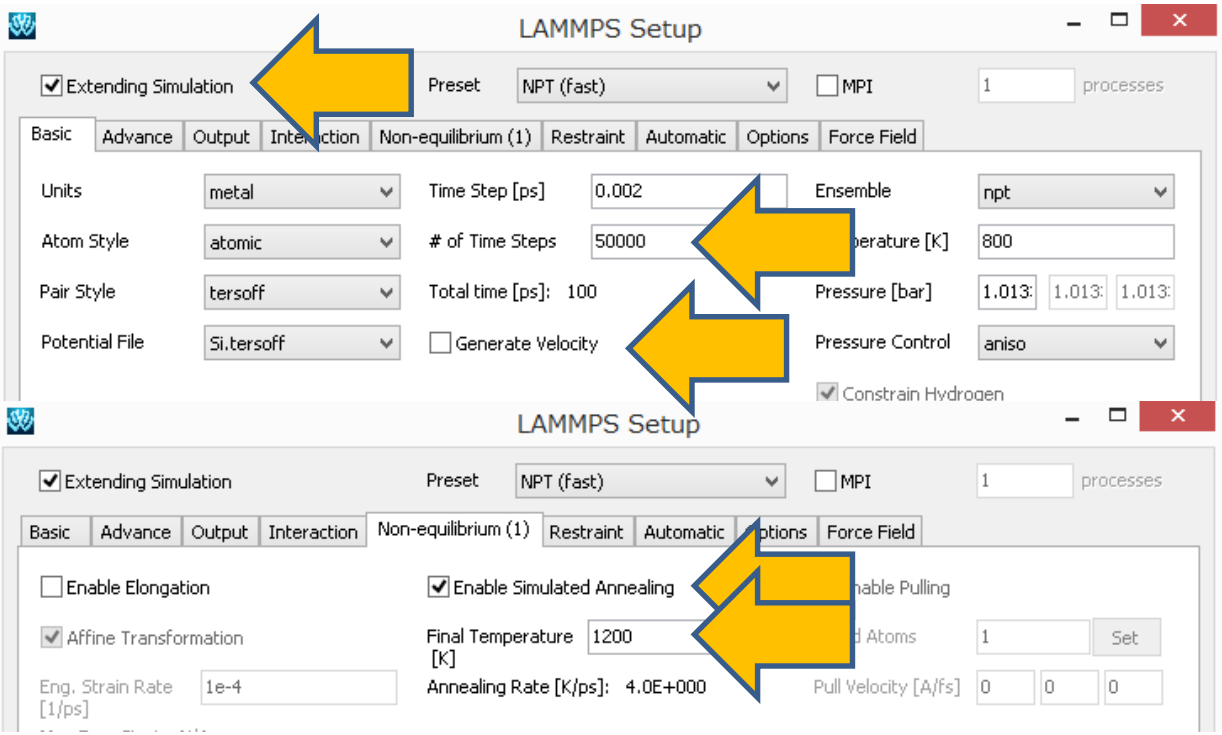
[MD]−[LAMMPS]−[LAMMPS実行]をクリックし、保存する.dataファイルの名前を指定すると計算が開始される。ここでは仮に「si333.data」とする。

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

X-Ability
クロスアビリティ

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。

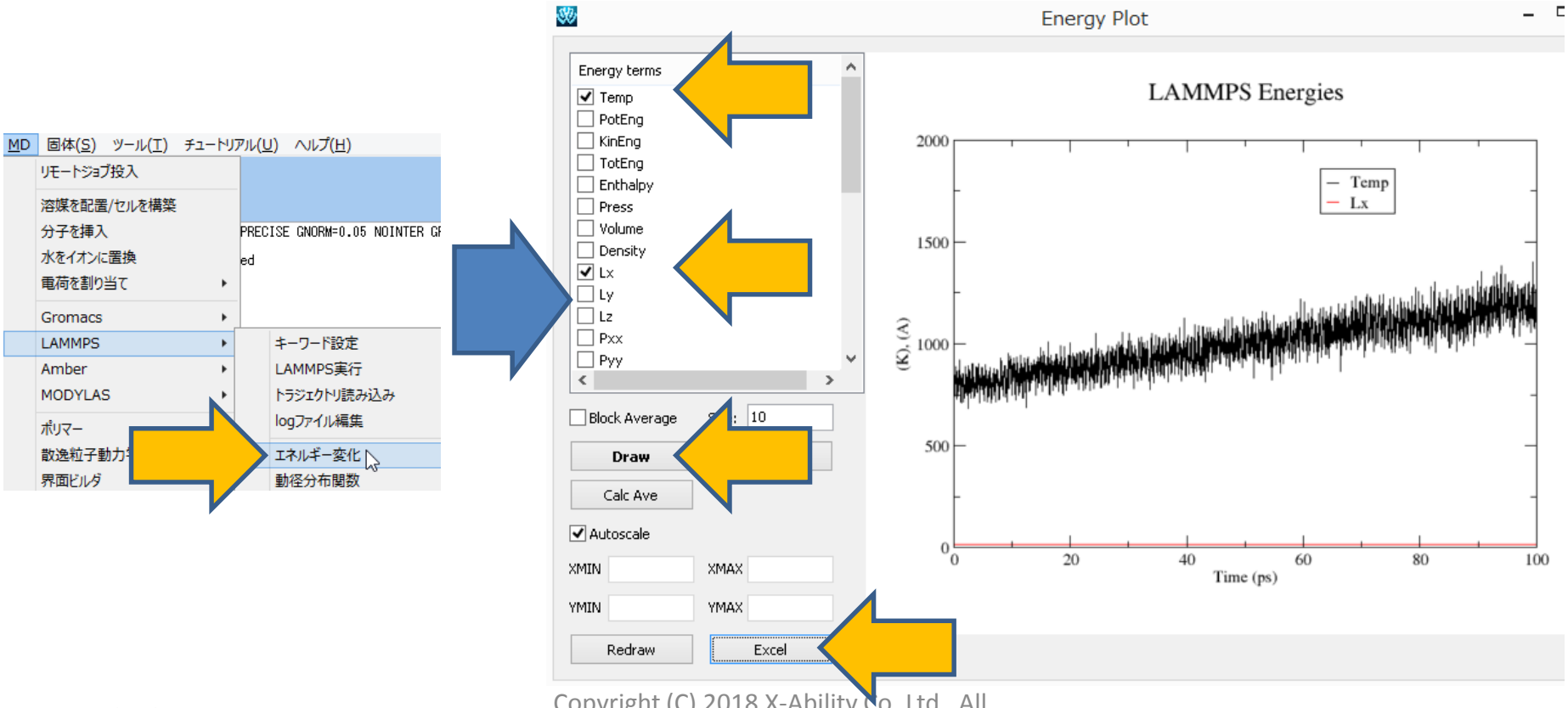


Copyright (C) 2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.

X-Ability
クロスアビリティ

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。



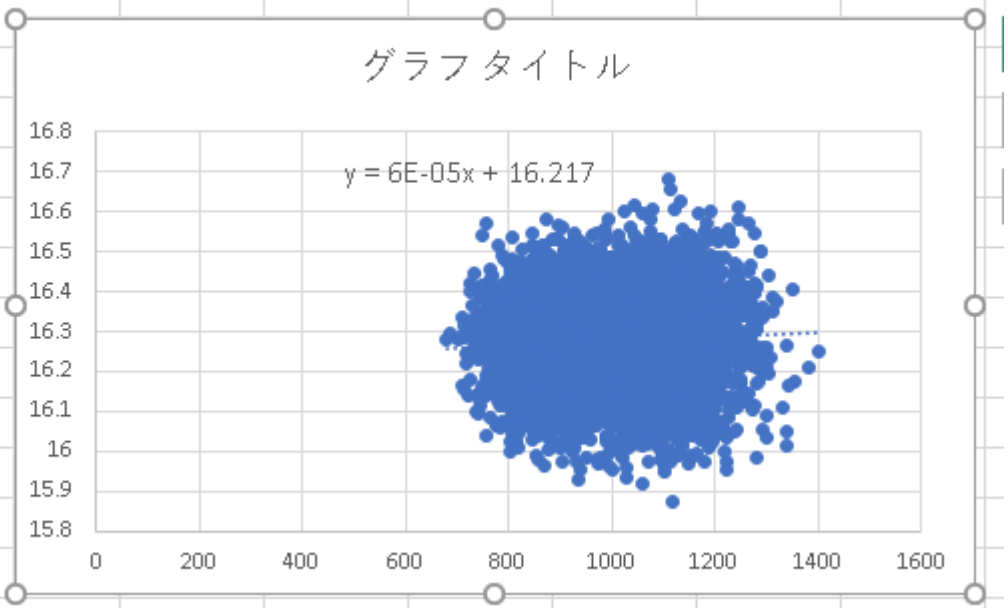
Copyright (C) 2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.

X-Ability
クロスアビリティ

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^{-1}となる。

	A	B	C
1	0	844.85	16.28592
2	0.02	836.1141	16.35293
3	0.04	802.7289	16.39876
4	0.06	826.5548	16.21422
5	0.08	752.9223	16.15728
6	0.1	773.2743	16.21857
7	0.12	741.5659	16.14639
8	0.14	748.8418	16.30885
9	0.16	789.7478	16.19417
10	0.18	800.6119	16.06789
11	0.2	819.8517	16.25382
12	0.22	829.214	16.28912
13	0.24	847.0159	16.16191



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

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