

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](mailto: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](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\\_2\\_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://rmp.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 installs of the LAMMPS molecular dynamics simulation software package. The binaries are built semi-automatic with MinGW's Linux to Windows cross compilers using up-to-date snapshots of the LAMMPS-ICMS git repository hosted at the Institute for Computational Molecular Science at Temple University. The LAMMPS binaries contain all libraries required to run in the Windows environment. The LAMMPS source code contains all dependencies (GCC, CMake, OpenMPI, MPI support, cross compilation). KOKKOS and USER-INTEL do not support cross-compilation with GCC. USER-HMMD (requires external library: PYTHON) requires to bundle a full Python runtime. USER-QMCP (only useful when linking to a QM software) USER-QMCP (requires external library: SCALAPACK) is provided by the USER-BEANZ package which is included. The serial executable additionally does not require the MinGW or MSVC compiler. These builds are for Windows 7/8/10 64-bit systems, which means no native builds for a

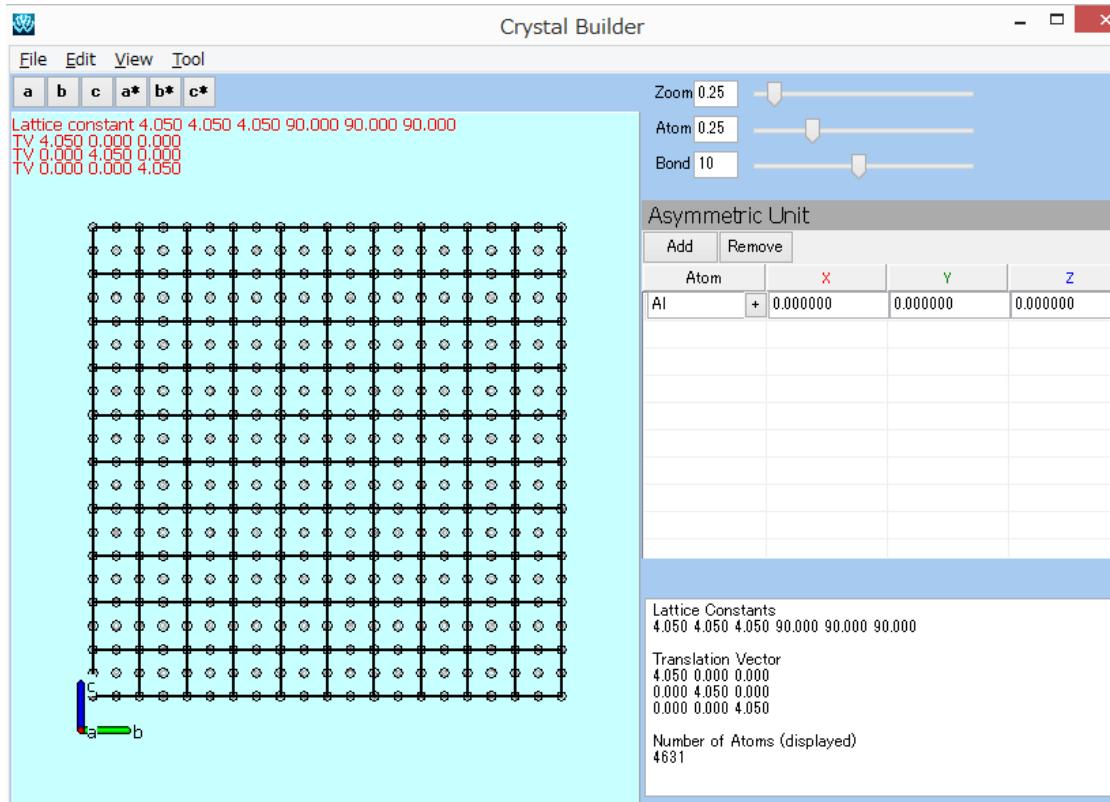


# I. 系の作成

[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。

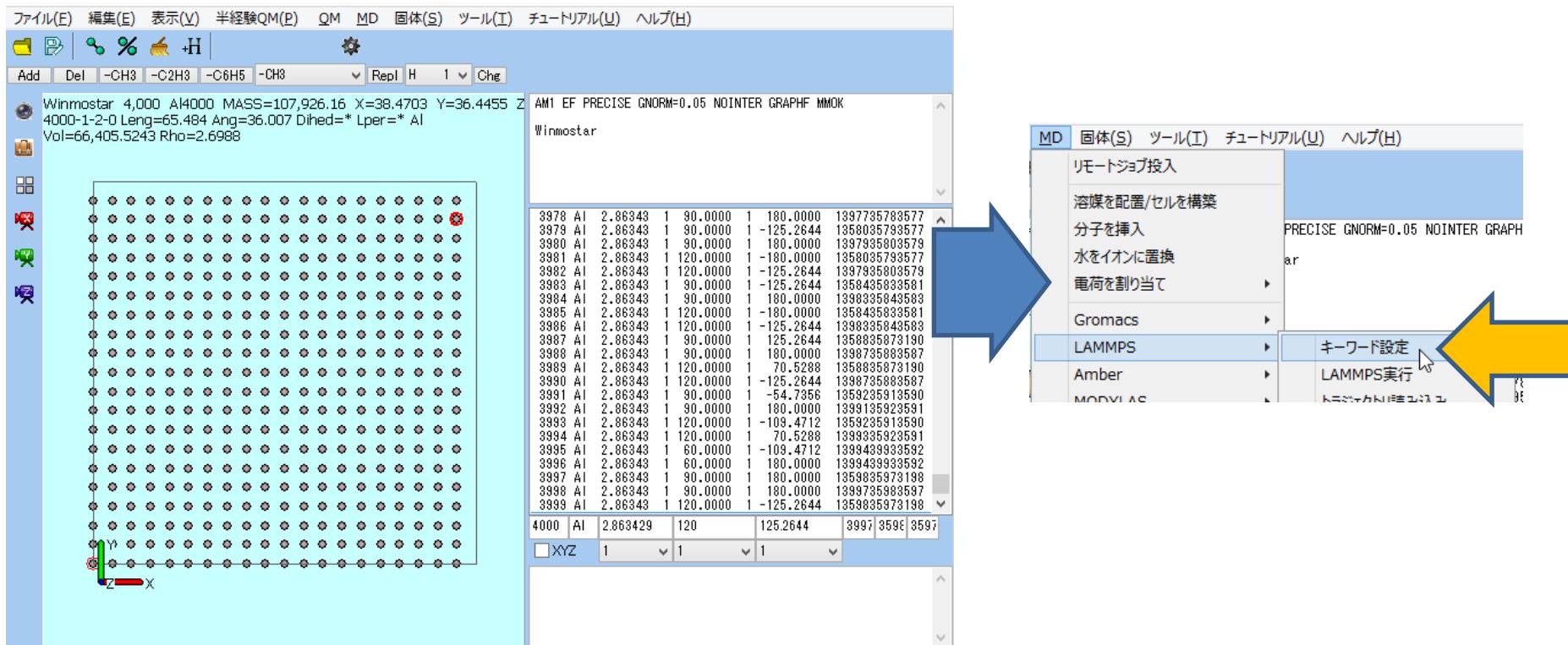
次に、[Edit]-[Repeat]にて $10 \times 10 \times 10$ にスーパーセル展開する。

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。



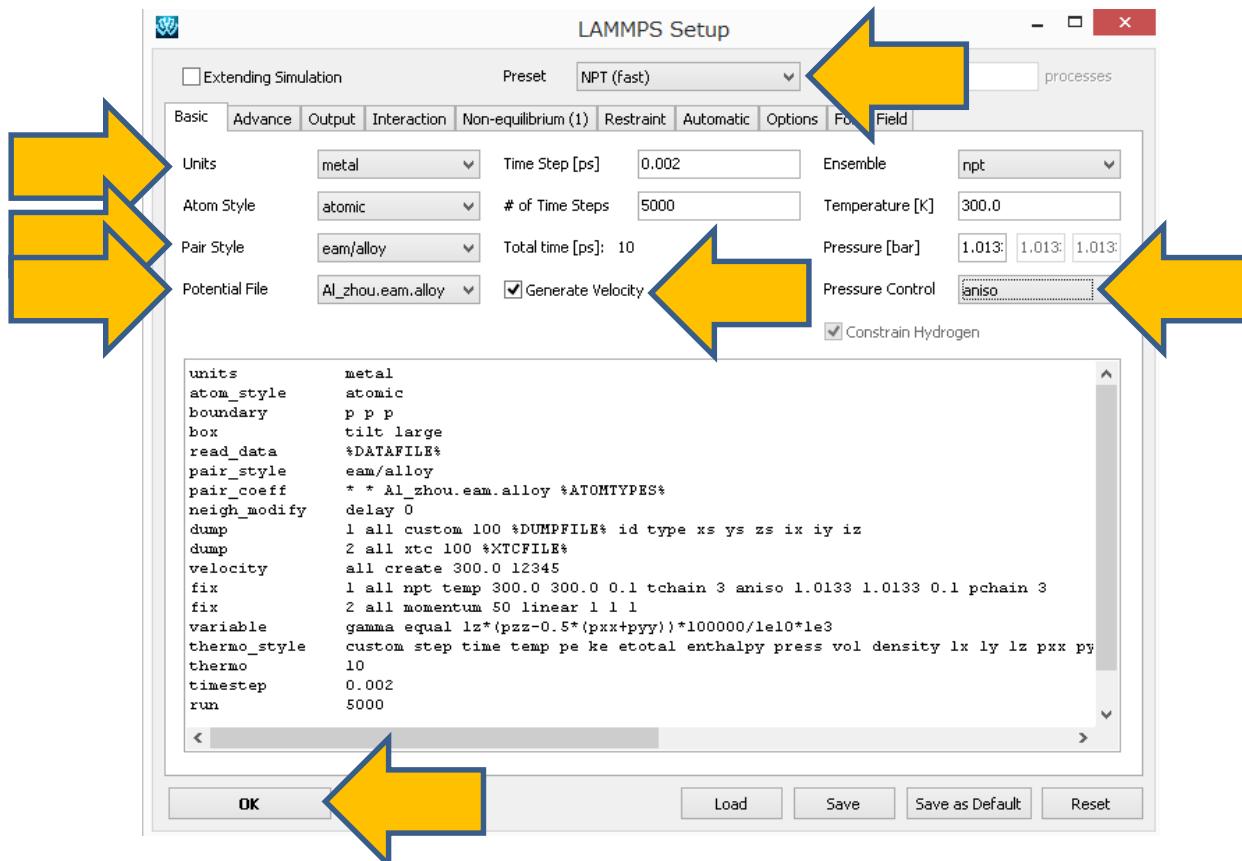
## II. 系の平衡化

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。



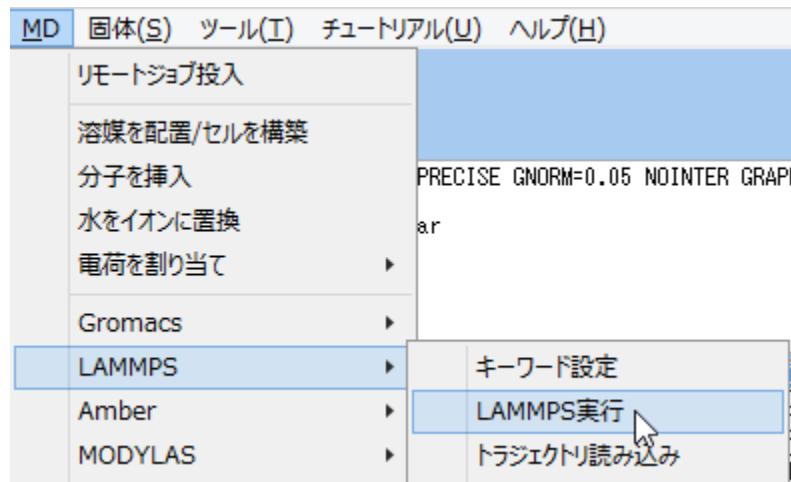
## II. 系の平衡化

「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。



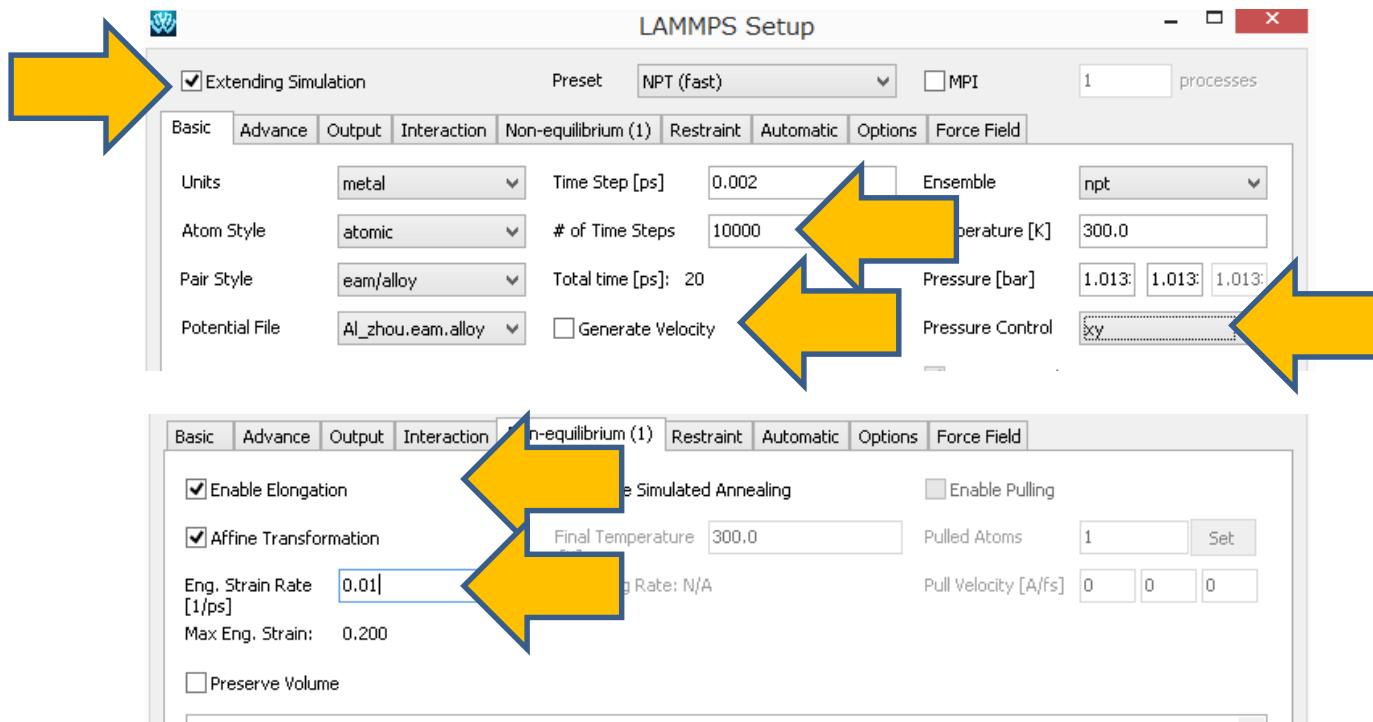
## II. 系の平衡化

[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。



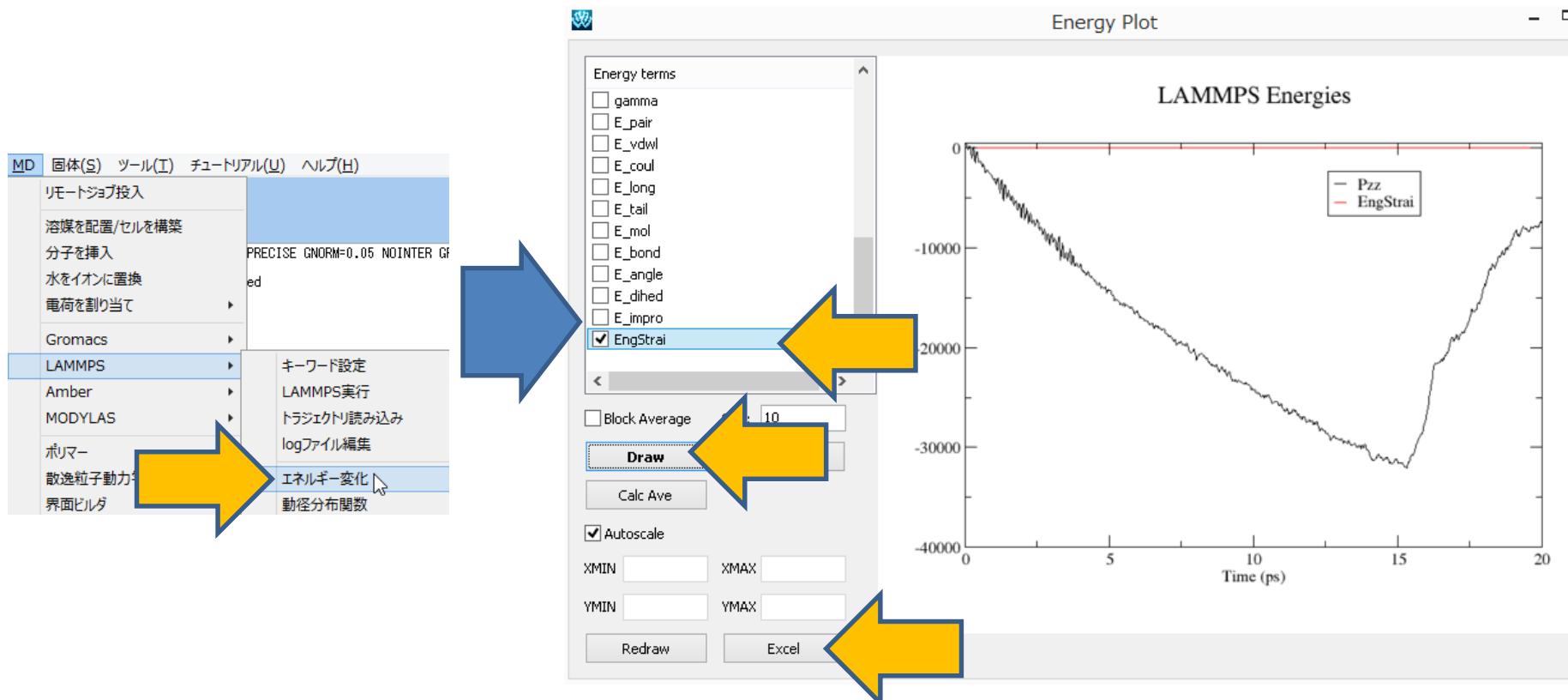
### III. 伸長計算

[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。



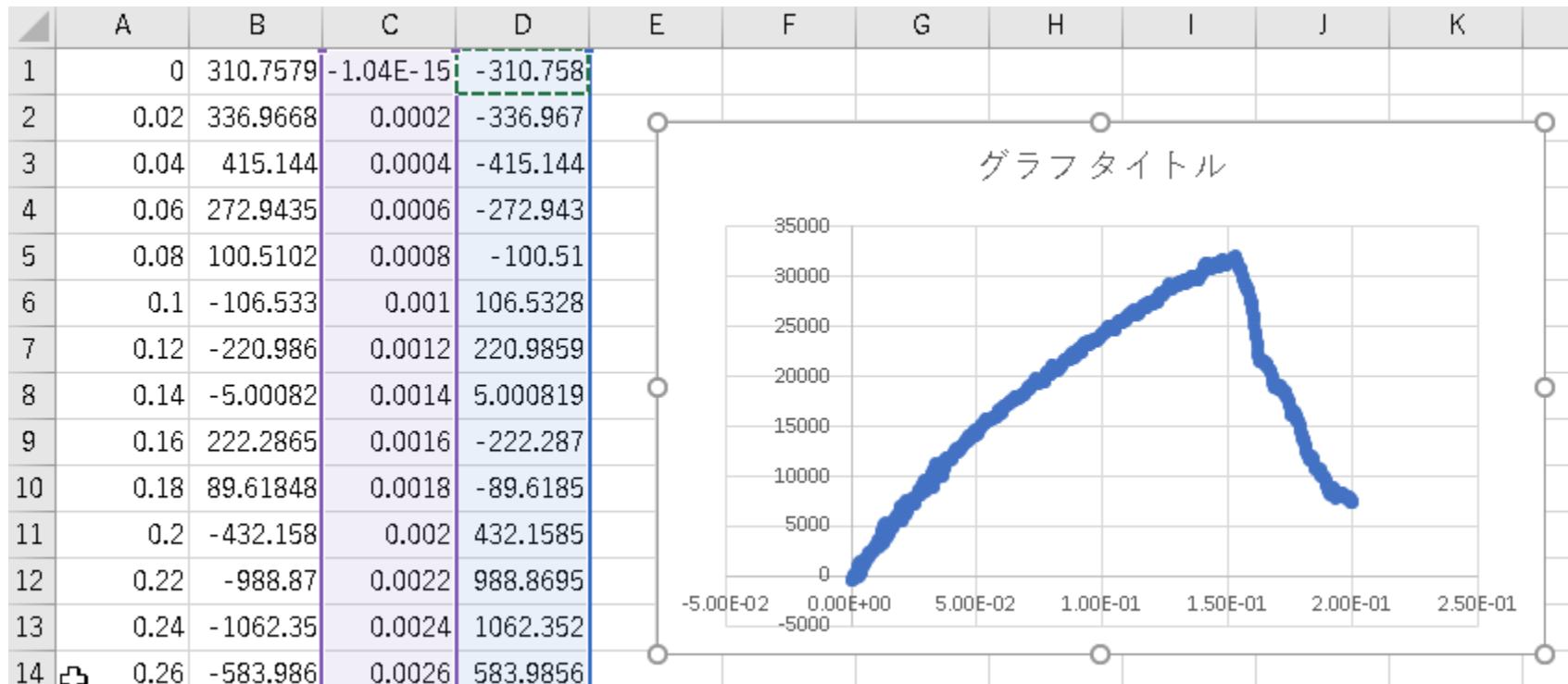
## IV. 結果解析

[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。



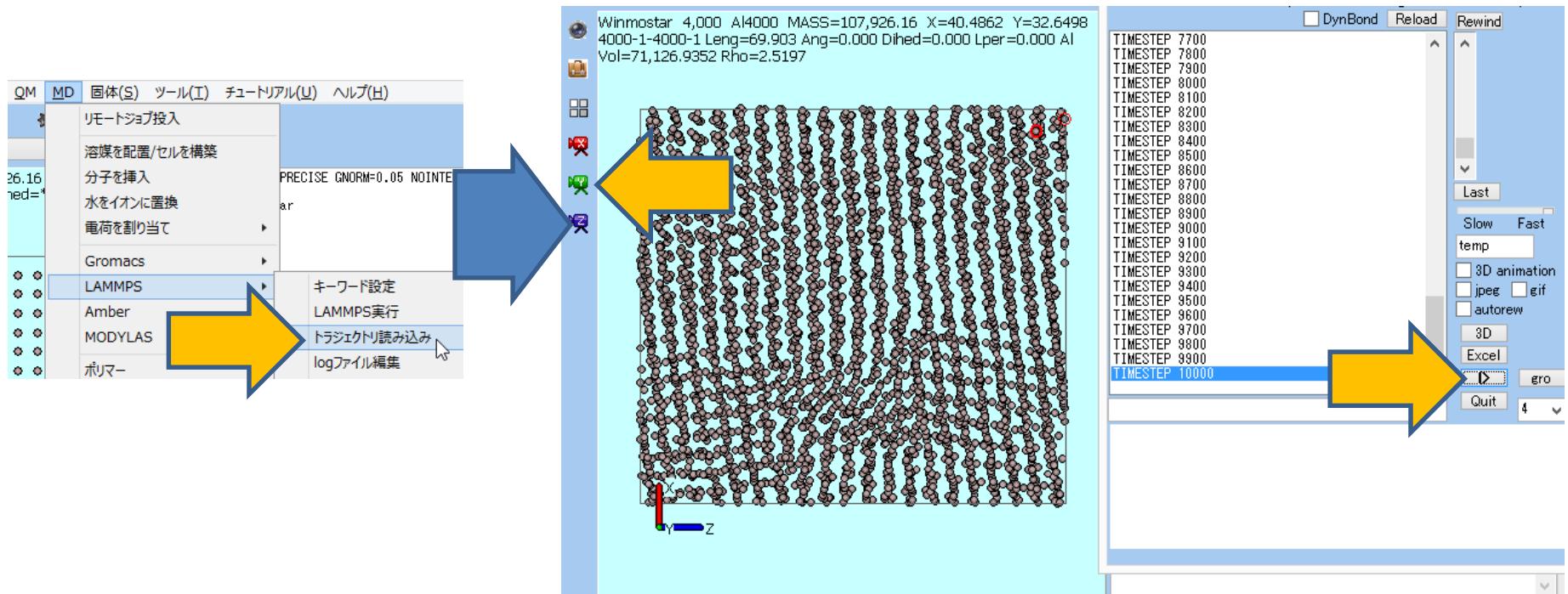
## IV. 結果解析

CSVを開き、x軸に3カラム目(工業ひずみ)、y軸( $P_{zz}$ )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。



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 ログイン パスワードを忘れた場合 ログインヘルプ

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

いいね！

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 >

山口 達明

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...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...)

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