

Winmostar チュートリアル

LAMMPS

融点計算

V8.000

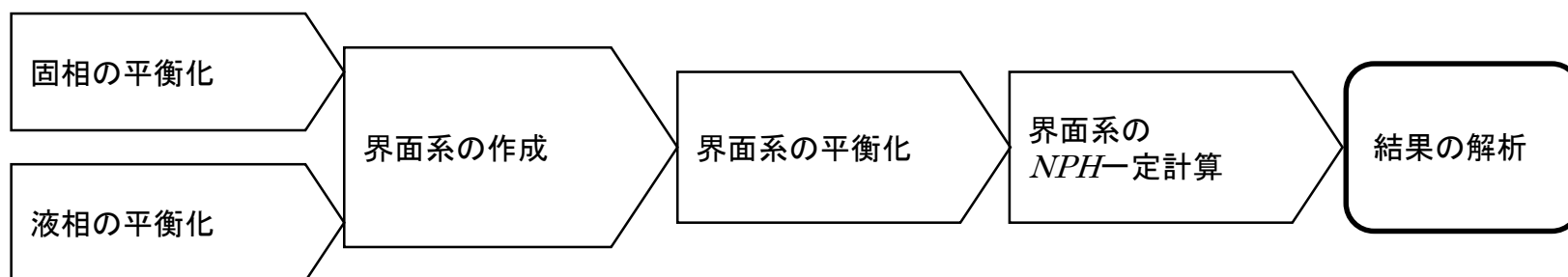
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/01

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があります。
- 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。

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

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_20160926
[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://rpm.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

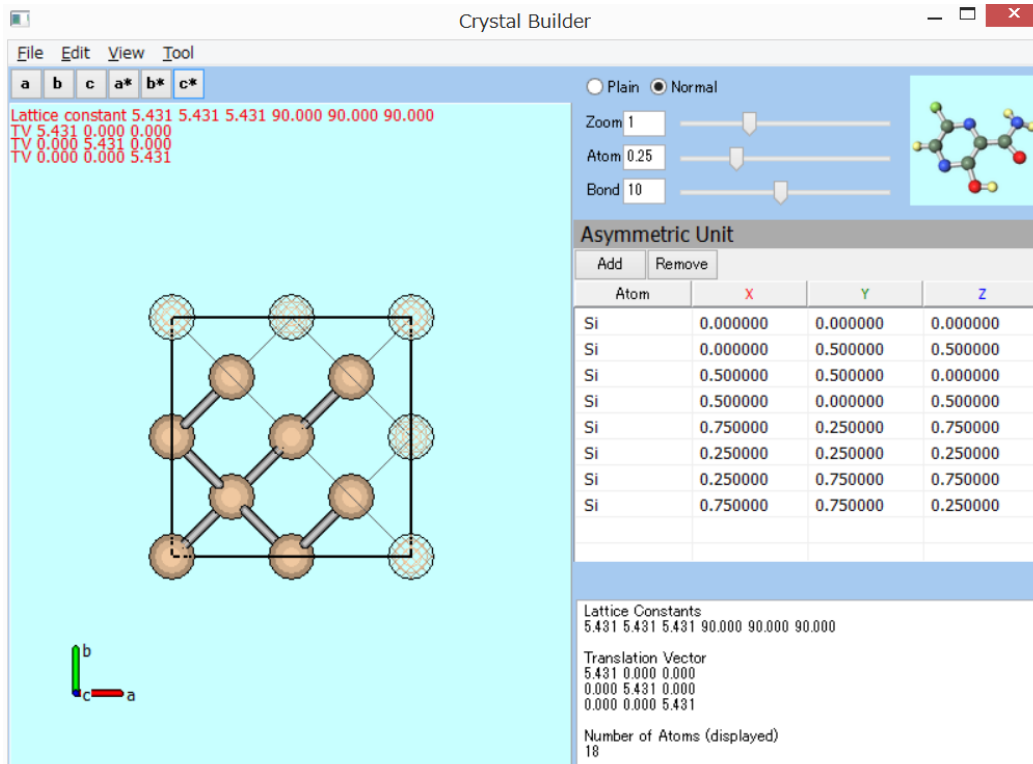
This repository is hosting pre-compiled Windows installers of the LAMMPS molecular dynamics simulation software package. The binaries are built semi-automatically with MinGW64 Linux to Windows cross compilers using up-to-date snapshots of the LAMMPS-ICMS git repository hosted at the Institute for Computational Molecular Science at Temple University. The LAMMPS binaries contain all optional packages included in the source distribution **except** KIM (license is not GPL compatible). USER_CUDA (CUDA does not support cross compilation), KOKOS and USER_INTEL (do not support cross-compilation with GCC), USER_HSD (requires external library) PYTHON (requires a full Python runtime), USER_LAMM (only useful when linking to a GM software), USER_SDL2 (requires external library), SCAI (supported by the USER_SCAI package which is included). The **serial** executable additionally does not contain the MPICH and USER_SDL2 packages, since these require MPI or SDL2, which are not available without further setup.



I. 固相の作成

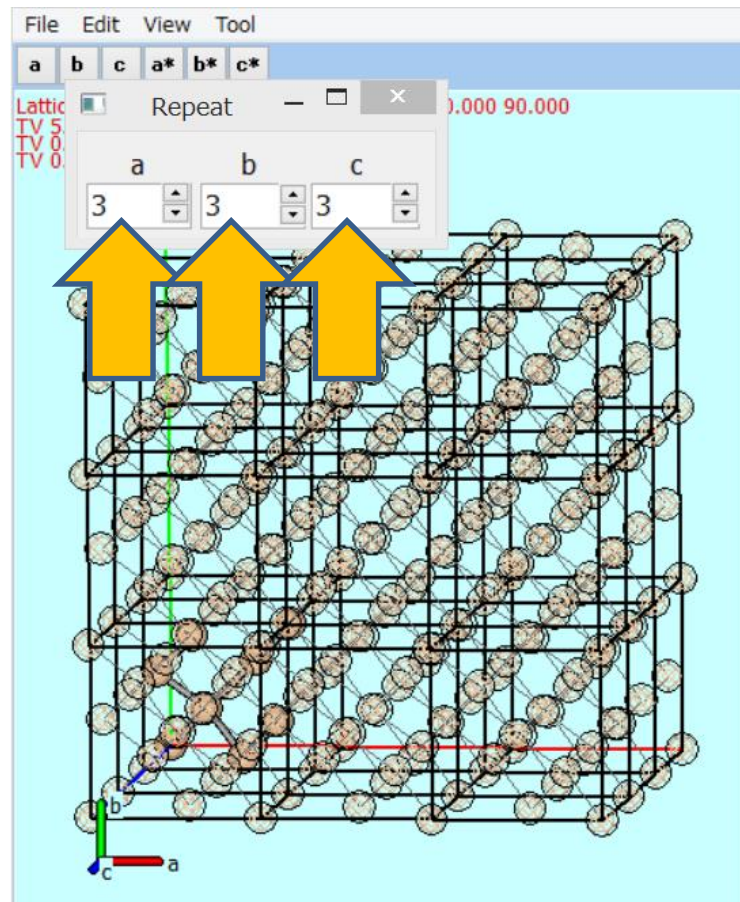
本チュートリアルでは、シリコンの融点を計算する。
[固体]-[結晶ビルダ]を起動し、[File]-[Open]からサンプルフォルダ内のsi.cifを開く。
(デフォルトではC:\winmos8\samples\si.cif)
あるいは、以下の設定を用いて結晶ビルダ上でSi結晶を作成する。

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



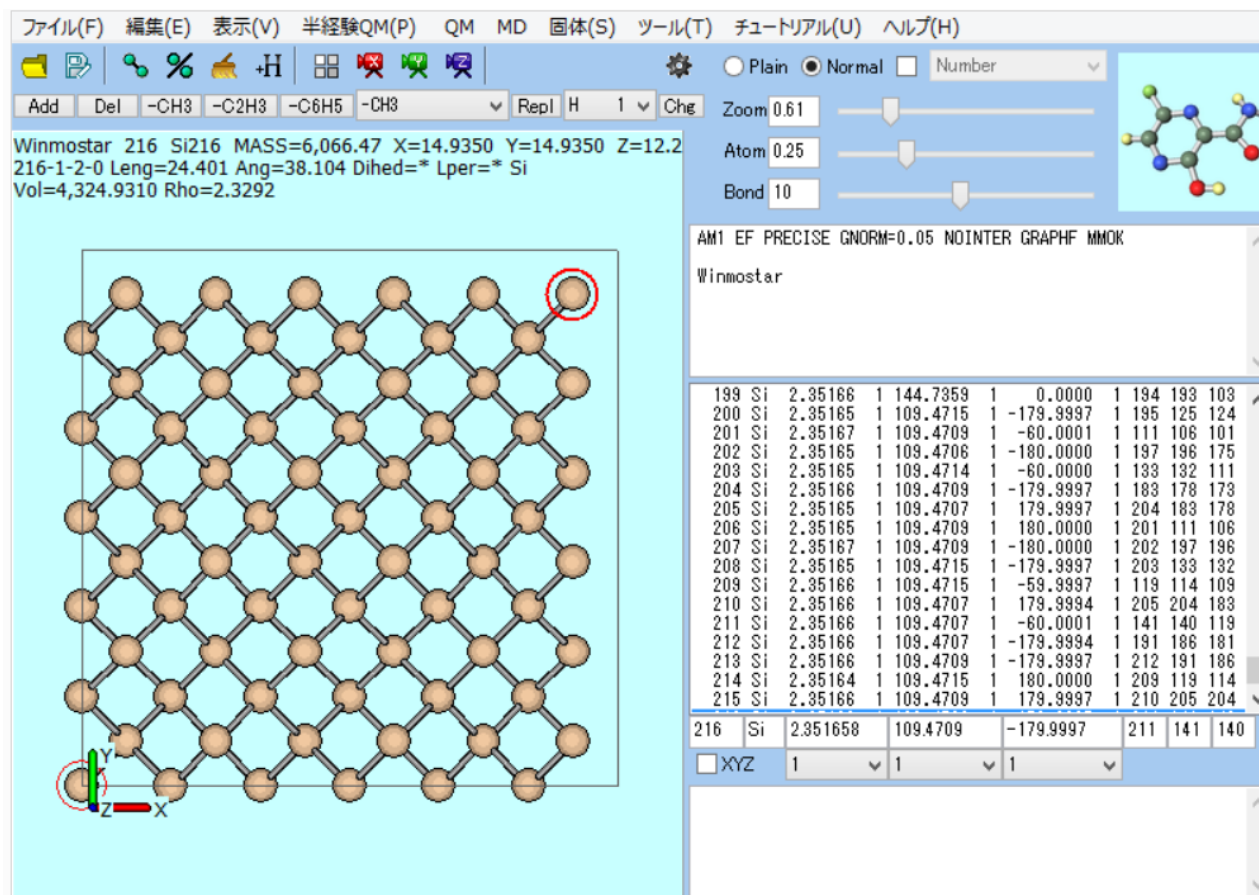
I. 固相の作成

[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。



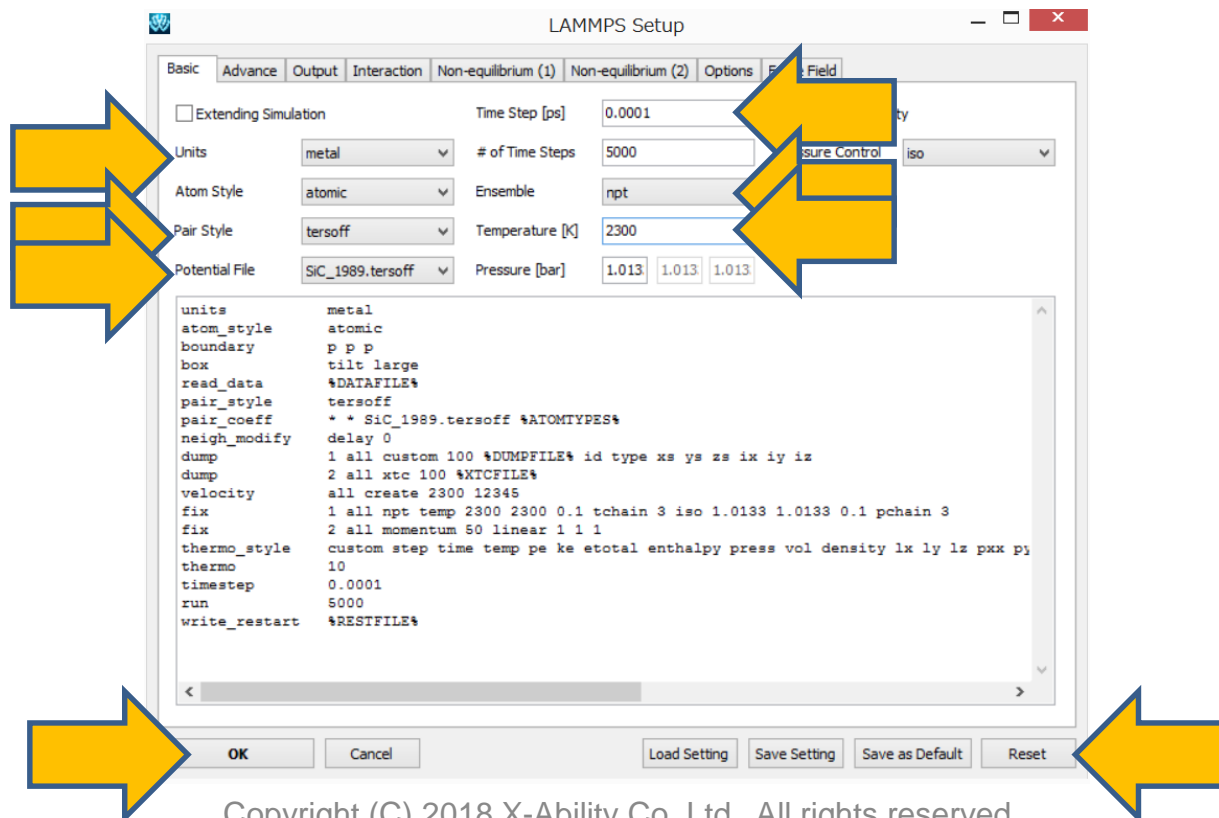
II. 固相の平衡化

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。



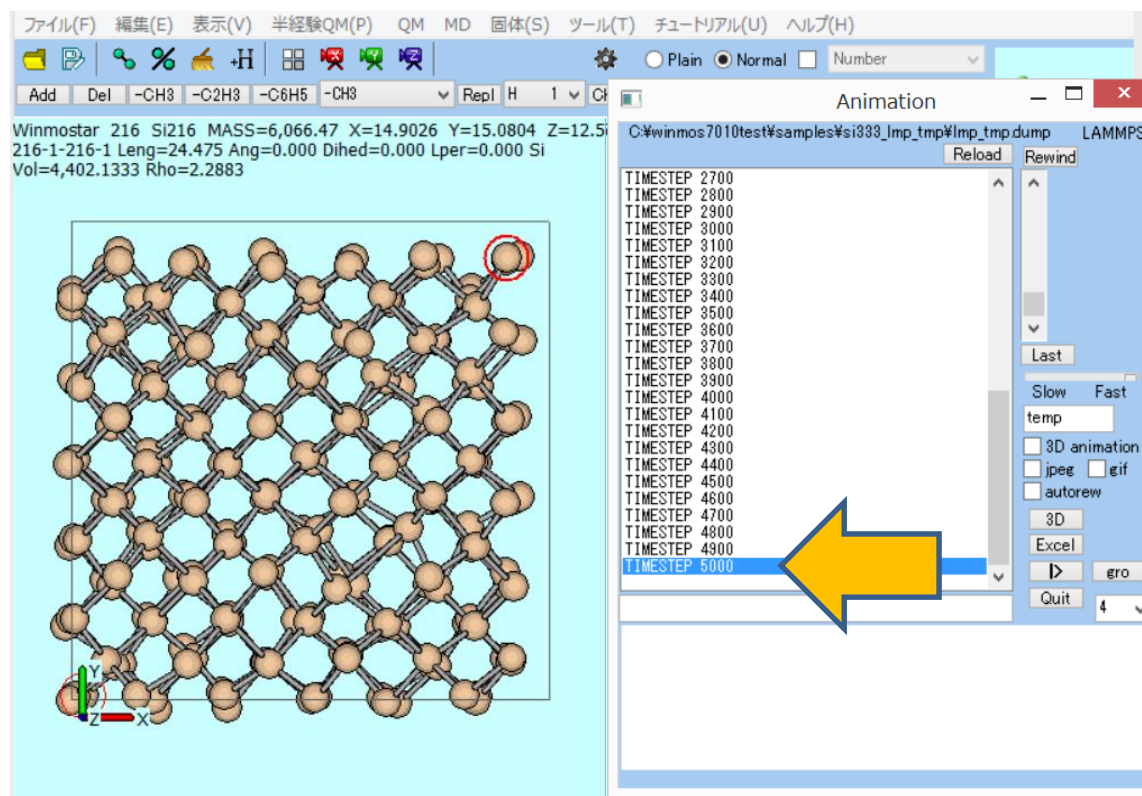
II. 固相の平衡化

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、一旦右下の「Reset」ボタンで設定をクリアする。「Units」を「metal」、「Pair Style」を「tersoff」、「Potential File」を「SiC_1989,tersoff」、「Ensemble」を「npt」、「Time Step」を「0.0001」、「Temperature」を「2300」に設定し、左下の「OK」を押す。



II. 固相の平衡化

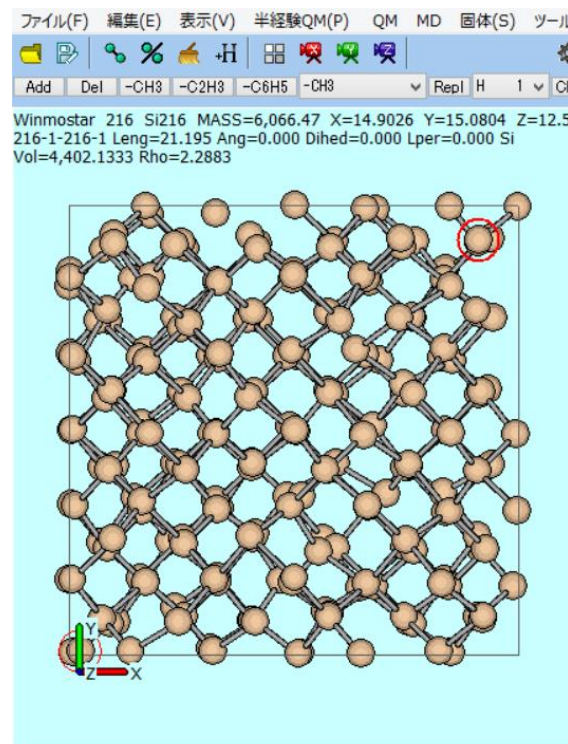
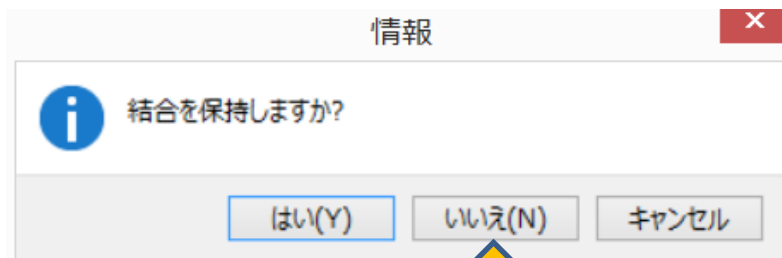
[MD]–[LAMMPS]–[LAMMPS実行]をクリックし、ファイル名を「si333.data」としてLAMMPS計算を開始する。計算終了後、[MD]–[LAMMPS]–[トラジェクトリ読み込み]をクリックし、デフォルトで選ばれるdataとdumpファイルを開く。開いたAnimationウインドウで最終構造を選択して表示し、Animationウインドウを閉じる。



II. 固相の平衡化

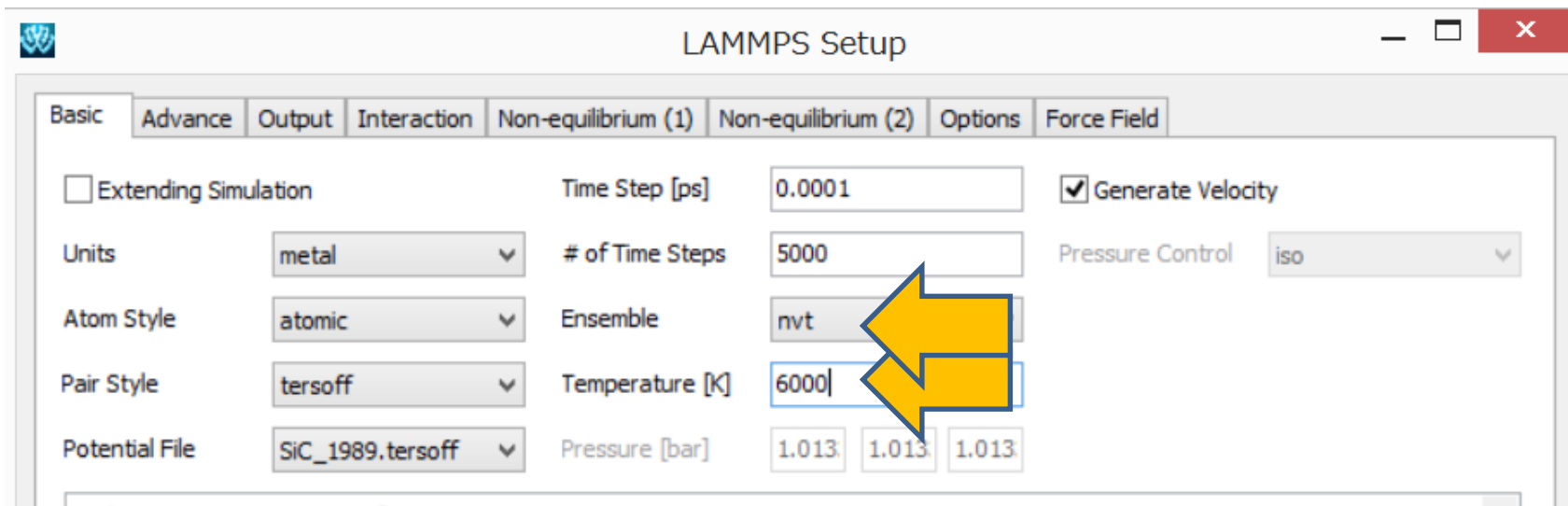
[編集]-[周期境界折り返し]をクリックし、以下のようなウインドウが表示されるので、「いいえ」を選択する。また、[表示]-[周期境界折り返し表示]で「原子」を選択する。

その後[ファイル]-[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

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Ensemble」を「nvt」、「Temperature」を「6000」に設定し、左下の「OK」を押す。そして、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。ファイル名は「si_liquid.data」とする。



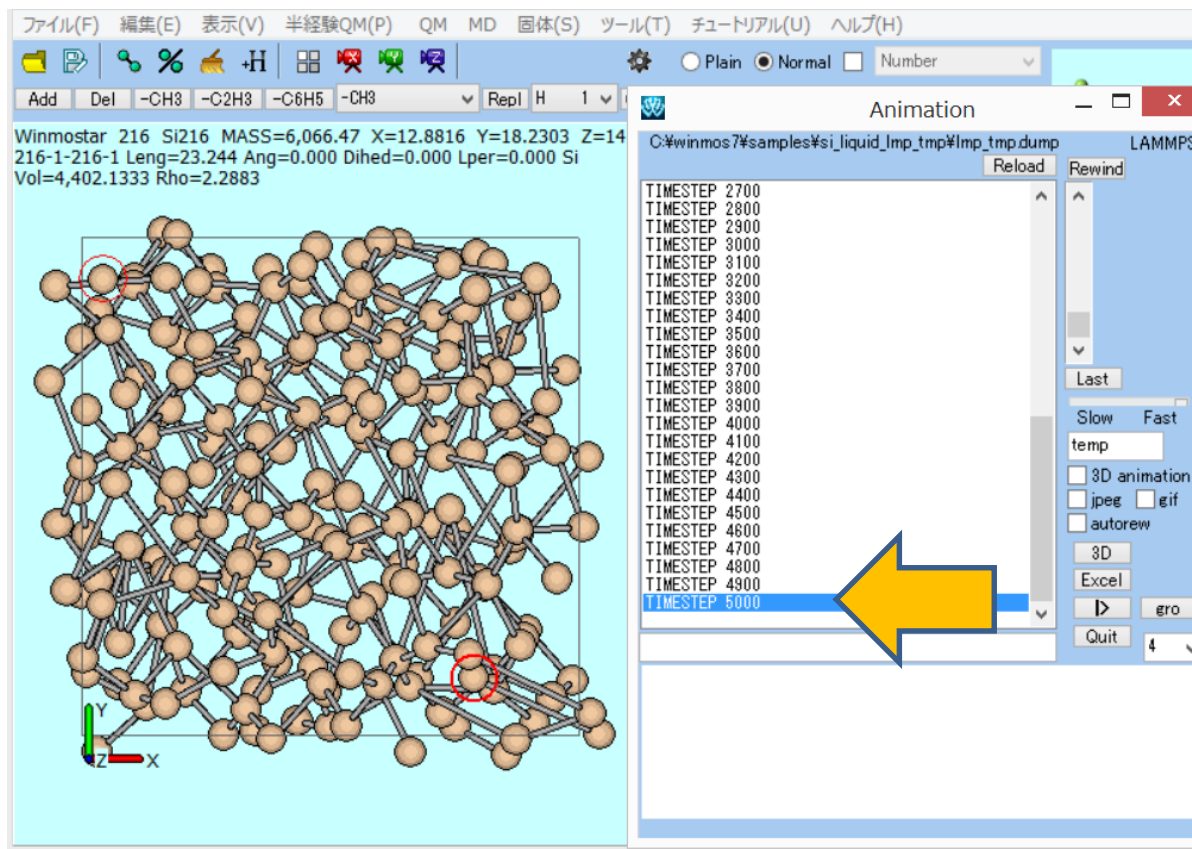
The screenshot shows the 'LAMMPS Setup' window with the 'Basic' tab selected. The settings are as follows:

| Field | Value |
|----------------------|-------------------------------------|
| Extending Simulation | <input type="checkbox"/> |
| Units | metal |
| Atom Style | atomic |
| Pair Style | tersoff |
| Potential File | SiC_1989.tersoff |
| Time Step [ps] | 0.0001 |
| # of Time Steps | 5000 |
| Ensemble | nvt |
| Temperature [K] | 6000 |
| Pressure [bar] | 1.013, 1.013, 1.013 |
| Generate Velocity | <input checked="" type="checkbox"/> |
| Pressure Control | iso |

Two yellow arrows are overlaid on the image: one points to the 'Ensemble' dropdown menu (which is currently set to 'nvt'), and the other points to the 'Temperature [K]' input field (which contains the value '6000').

III. 液相の平衡化

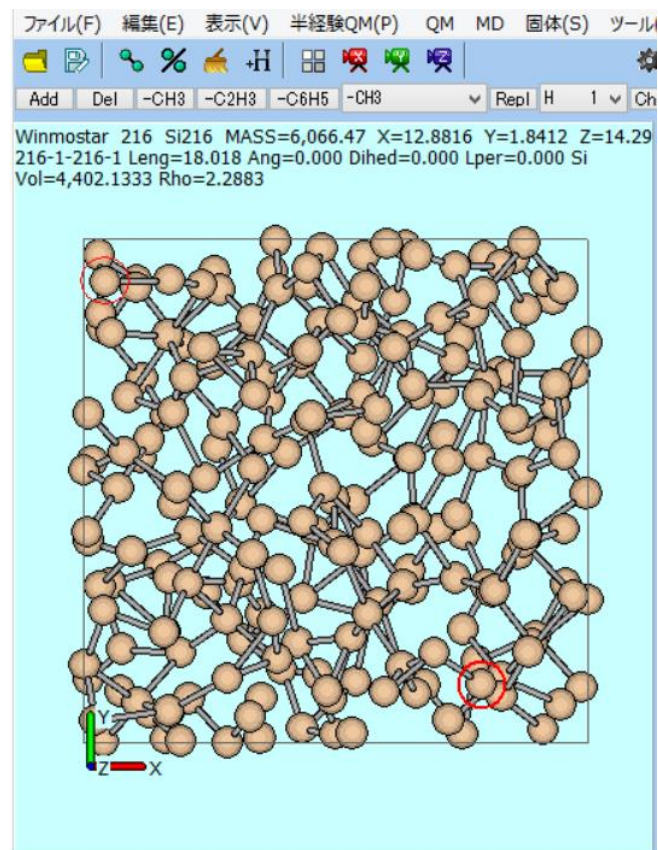
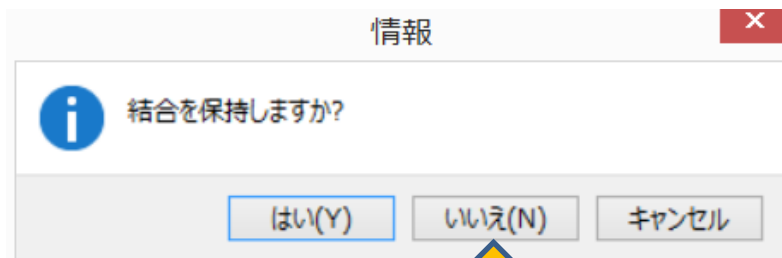
計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[トラジェクトリ読み込み]をクリックし、デフォルトで選ばれるdataとdumpファイルを開く。開いたAnimationウインドウで最終構造を選択して表示し、Animationウインドウを閉じる。



III. 液相の平衡化

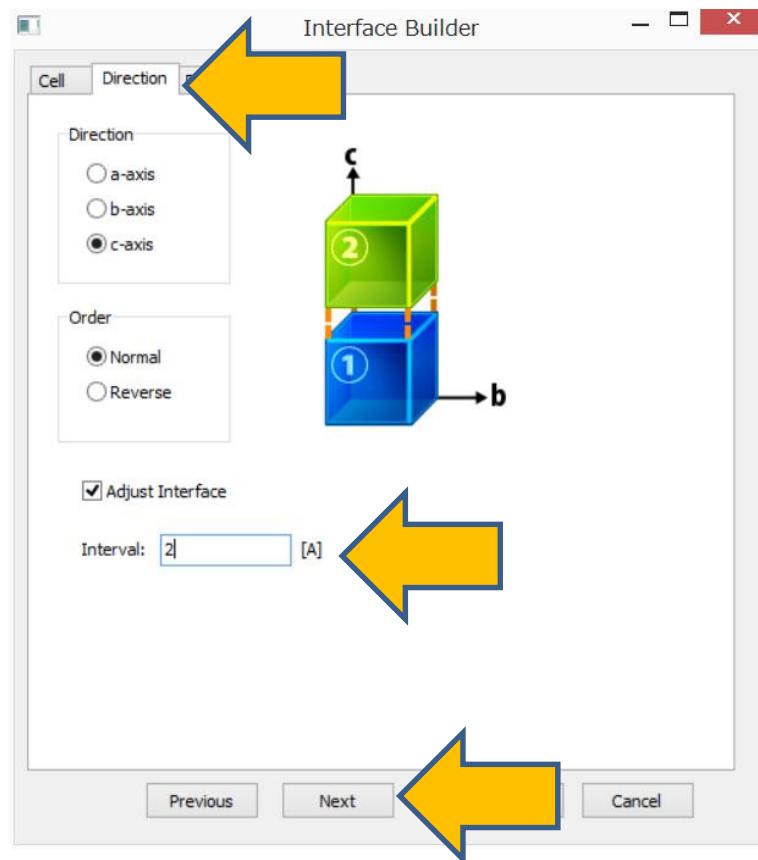
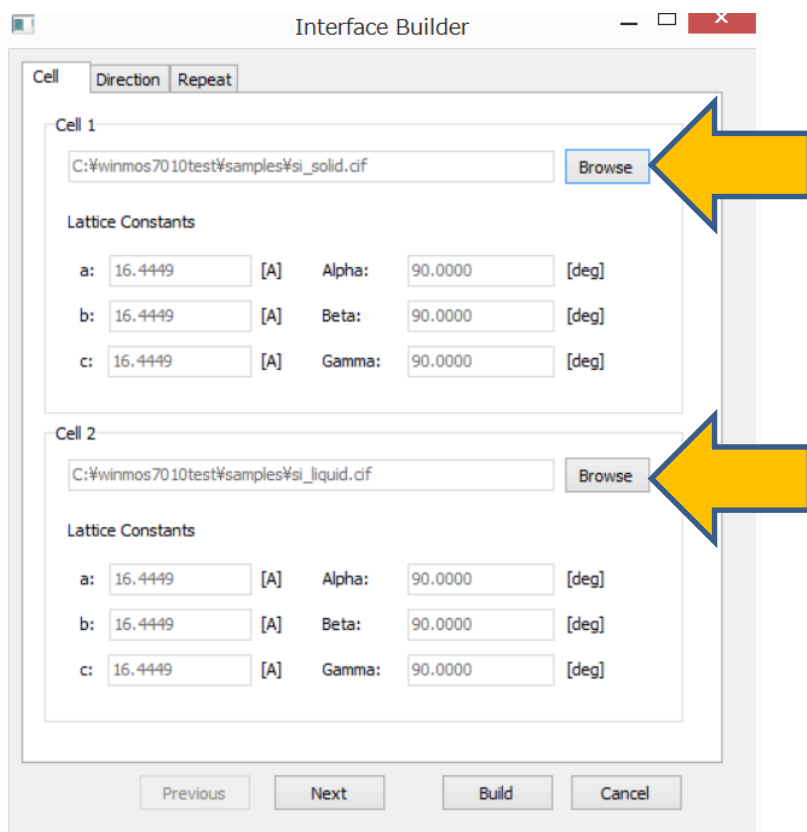
[編集]-[周期境界折り返し]をクリックし、以下のようなウインドウが表示されるので、「いいえ」を選択する。

その後[ファイル]-[名前を付けて保存]にて「si_liquid.cif」として保存する。



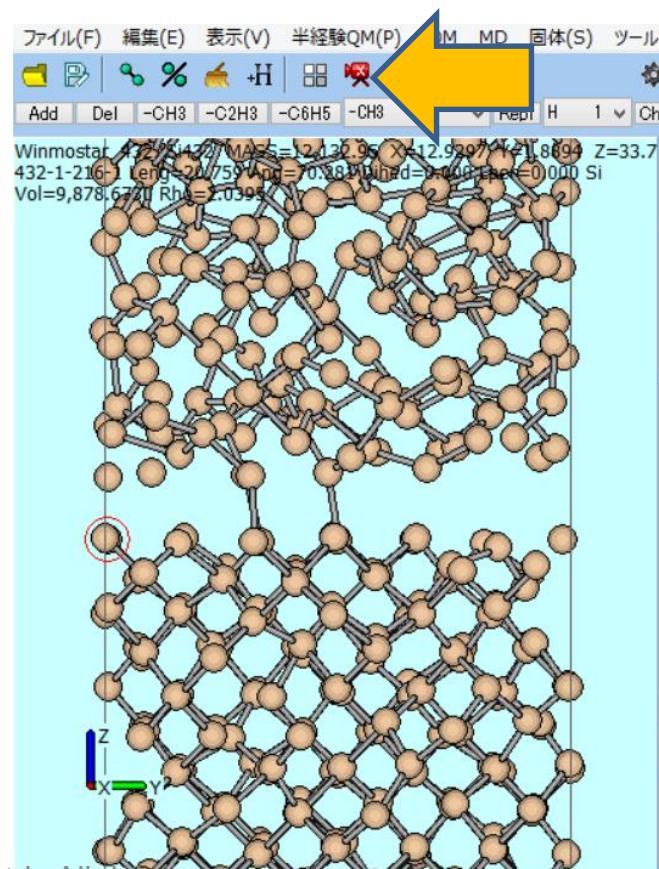
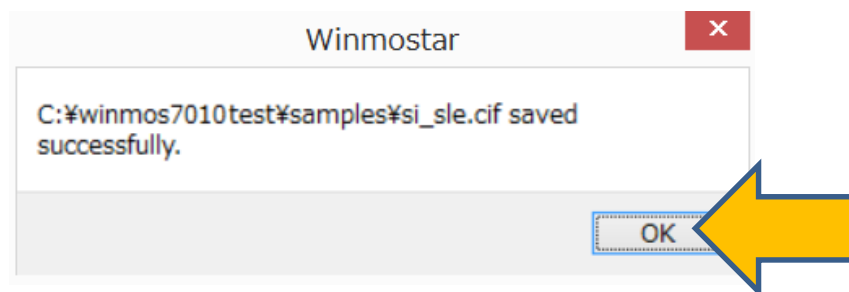
IV. 固液界面系の作成

[MD]-[界面ビルダ]を開き、「Cell 1」の「Browse」ボタンで「si_solid.cif」を、「Cell 2」の「Browse」ボタンで「si_liquid.cif」をそれぞれ選択する。
次に「Direction」タブの「Interval」を「2」に設定し、「Build」をクリックする。



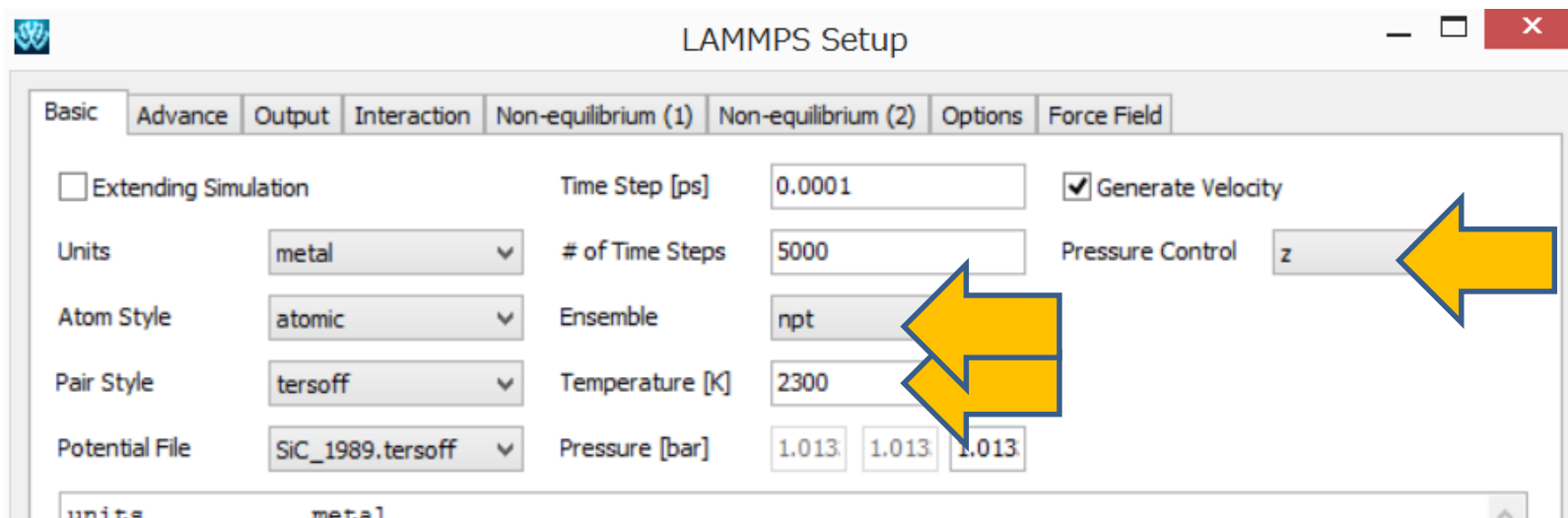
IV. 固液界面系の作成

ファイル名は「si_sle.cif」とし保存すると、以下のようなウィンドウが現れるので「OK」を押す。Interface Builderウィンドウは「Cancel」ボタンで閉じる。
メイン画面の赤いXのカメラのボタンをクリックすると界面の様子が見える。



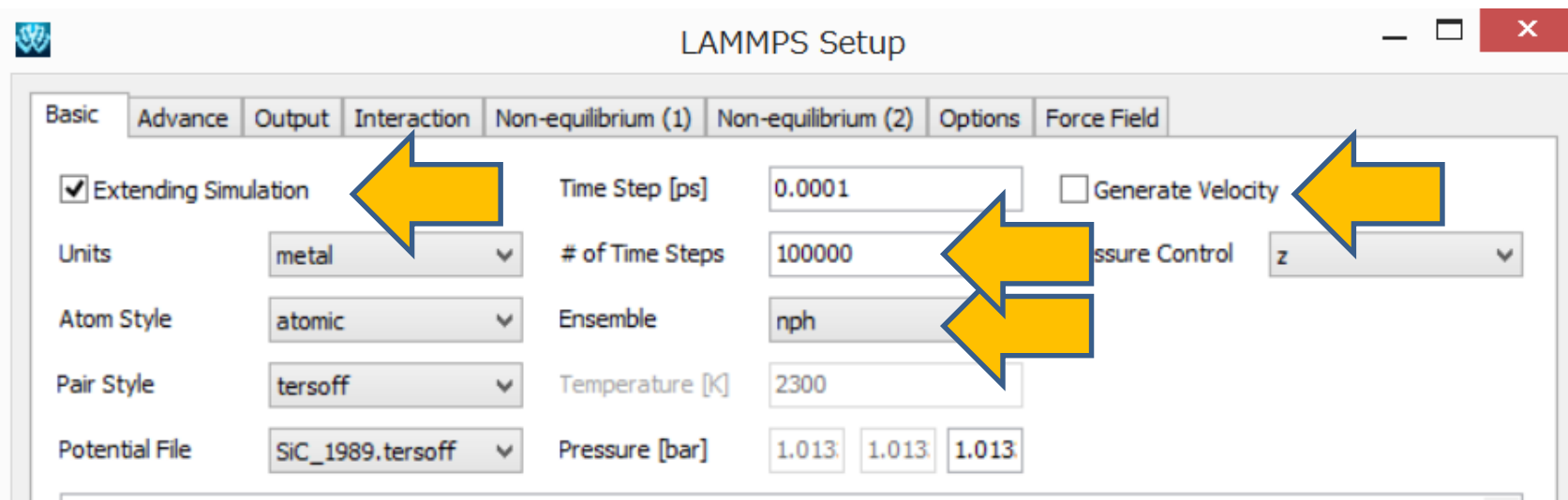
V. 界面系の平衡化

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Ensemble」を「npt」、「Temperature」を「2300」、「Pressure Control」を「z」に設定し、左下の「OK」を押す。そして、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。ファイル名は「si_sle.data」とする。



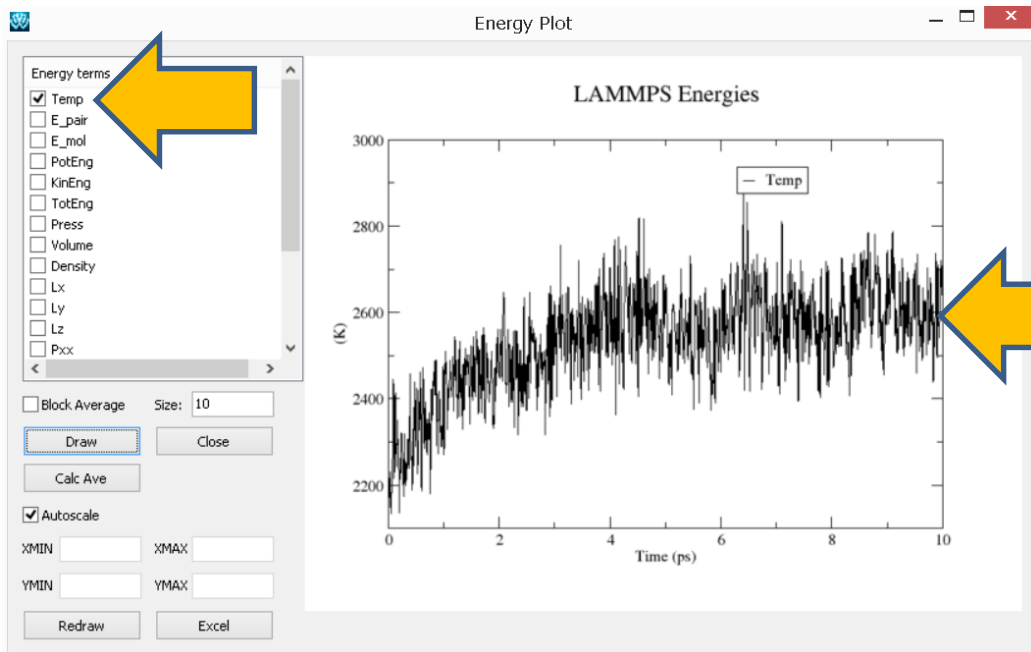
VI. 融点の算出

計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Extending Simulation」をチェックし、「# of Time Steps」を「100000」、「Ensemble」を「nph」に設定し、「Generate Velocity」のチェックを外し、左下の「OK」を押す。そして、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



VI. 融点の算出

計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]を開き、デフォルトで選ばれるログファイルを開く。「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2600 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2600 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.

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

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！

いいね！ 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

デジタル投稿

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