



shaping tomorrow with you

**SCIGRESS ME 2.3 のLAMMPS連携機能のご紹介/体験実習**

**「SCIGRESS ME+LAMMPSを使ってみよう！」**

**2016年3月7日  
富士通株式会社**

# SCIGRESS ME 2.3 の LAMMPS 連携機能 ご紹介

- ◆ **GUI**がないため、テキストベースで入力データ作成、コマンド設定が必要となり、初心者にはハードルが高い。
- ◆ **モデリング機能**が不足しているため、複雑な構造作成が難しい。  
※ コマンドでの構造生成、座標データの読み込みは可能。
- ◆ **ポテンシャル設定**が煩雑である。  
分子系では、結合・結合角・二面角・面外角を全て種類ごとに設定する必要がある。大きな分子では膨大な数の設定になる。

**SCIGRESS ME** は、入力データ作成から結果解析まで行える分子動力学ソフトウェアです。**LAMMPS I/F**により、LAMMPSと連携してMD計算を実行できます。

※ LAMMPSのMD計算機能のみが対象となります。粗視化MD、DPD、Peridynamicsなどは対象外です。

## SCIGRESS ME 2.3 LAMMPS I/Fの主な機能

入力データ作成	モデリング、計算条件設定、ポテンシャル設定、リスタートデータ生成
計算実行	逐次実行、バッチ計算
結果表示	アニメーション、軌跡、温度・圧力・体積等の時間変化グラフなど
二次解析	平均二乗変位、二体相関関数・積算配位数など

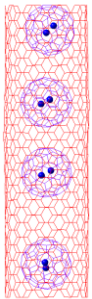
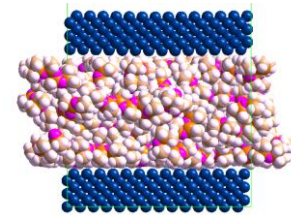
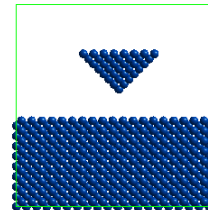
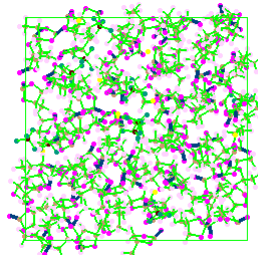
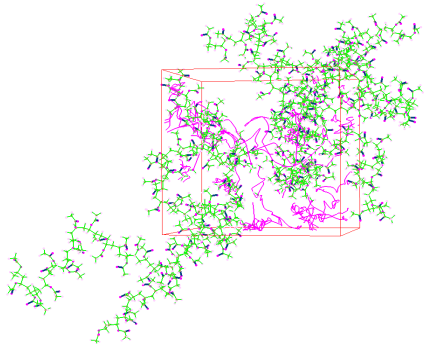
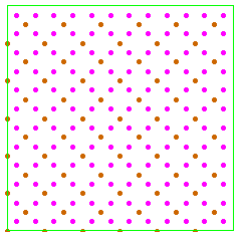
## SCIGRESS ME 2.3 の動作環境

OS	Windows Vista, 7
CPU	Pentium 4 以上
メモリ	2GB以上(推奨)

様々なモデルを作成するためのウィザードやツールが搭載されています。

## 主なモデリング関連機能

MDセル作成	ウィザード(ランダム、テンプレート(結晶)、高分子、液晶)、セルの貼り合わせ・積み重ねなど
編集	原子・分子のコピー、貼り付け、削除、挿入など
表示	回転、拡大・縮小、平行移動、正投影/透視投影、表示形式(スペースフィリング、ボール&スティック等)など

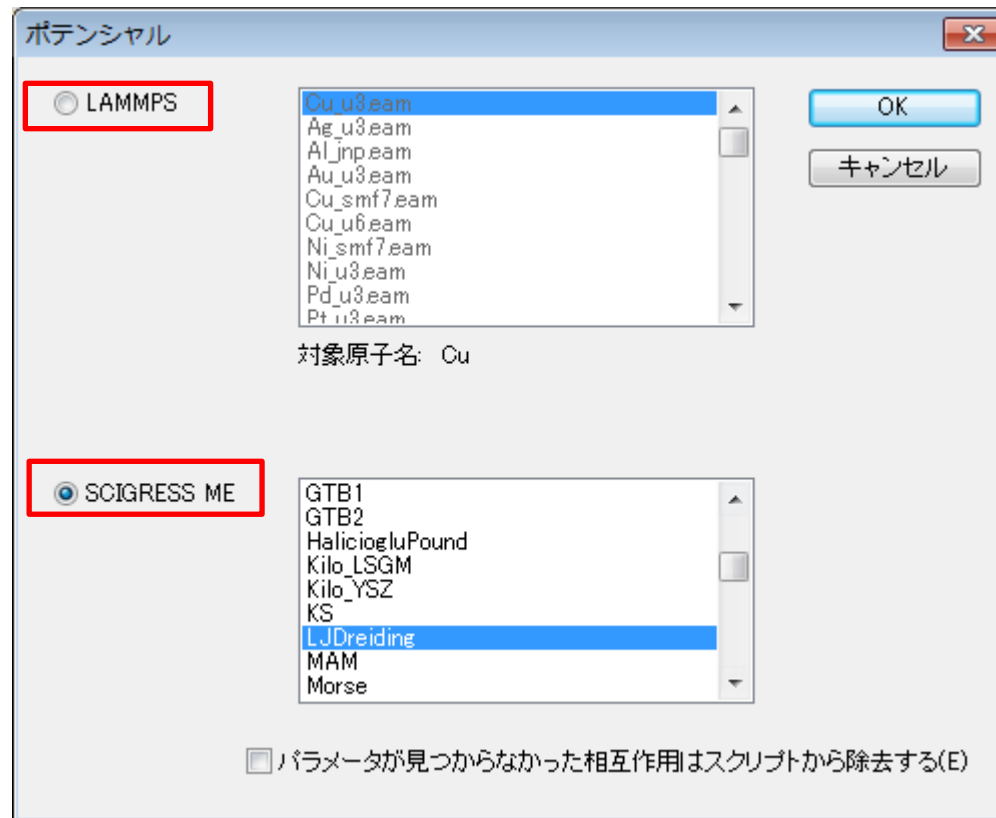


# 計算条件設定

アンサンブル、境界条件、応力印加等の基本的な設定ができます。

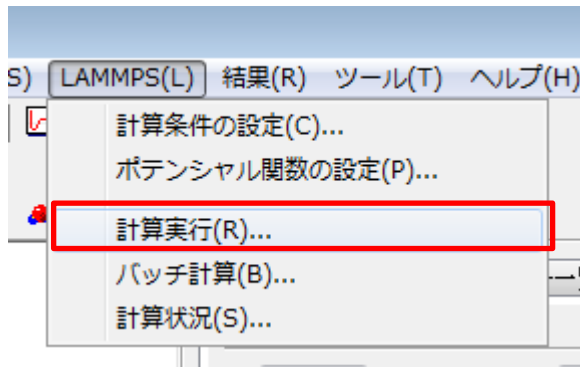
# ポテンシャル設定

LAMMPS添付のポテンシャルを選択して使用できます。  
SCIGRESS MEのポテンシャルの一部も使用できます。

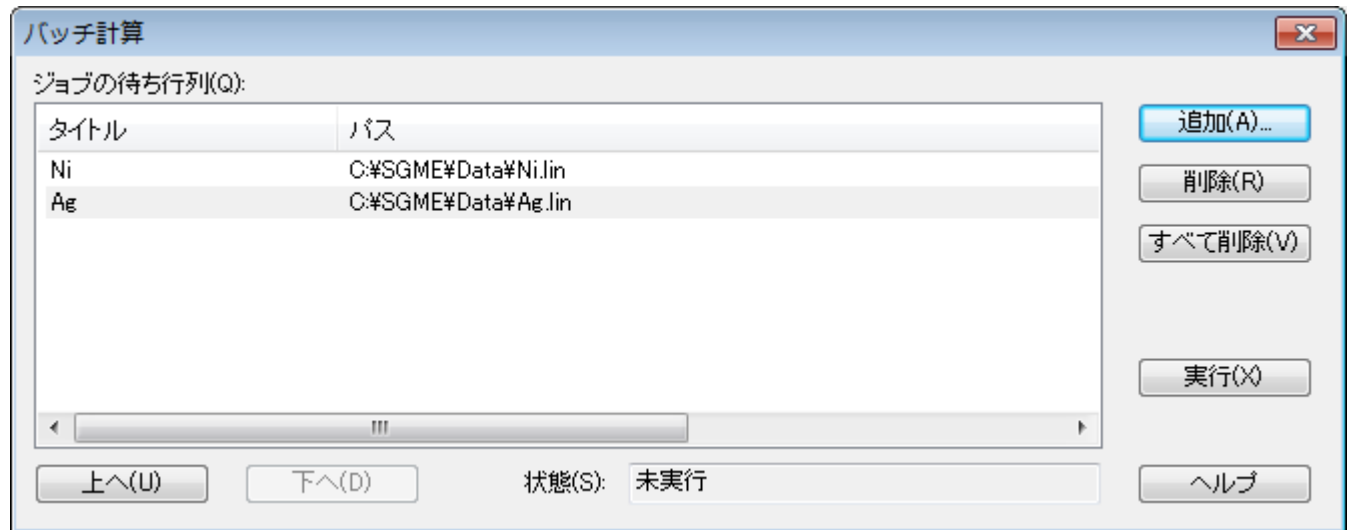


# 分子動力学計算の実行

SCIGRESS MEのメニューからLAMMPSのMD計算を実行できます。  
入力データを登録し、バッチ計算を行えます。



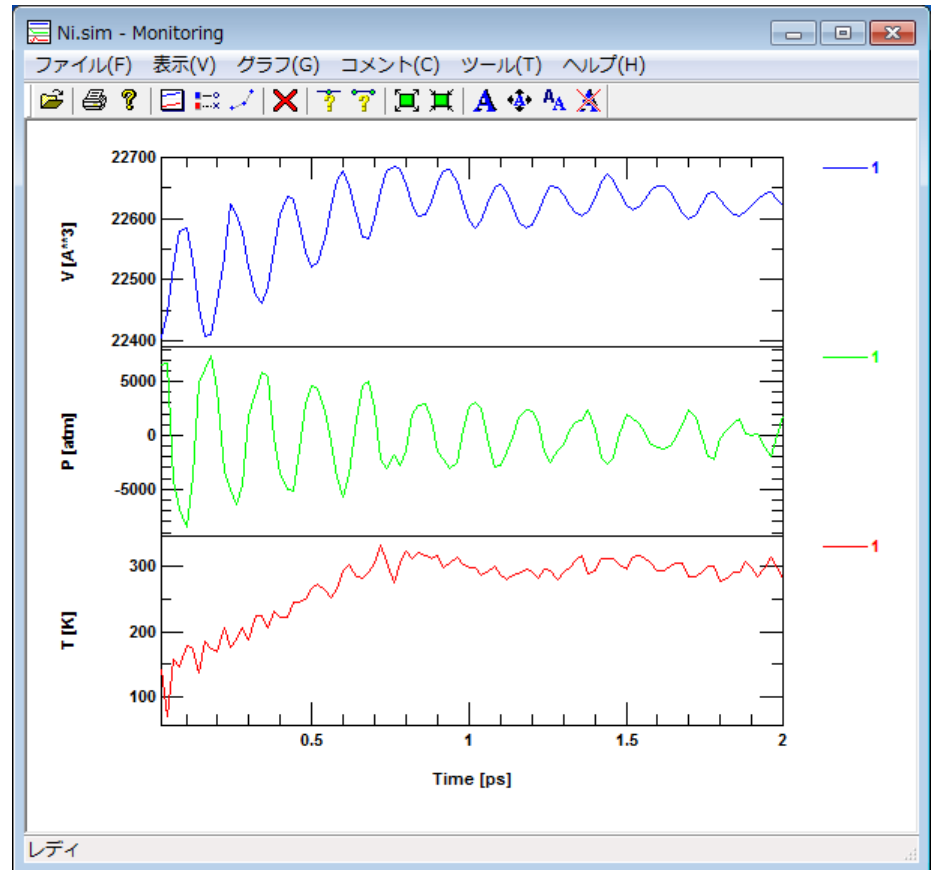
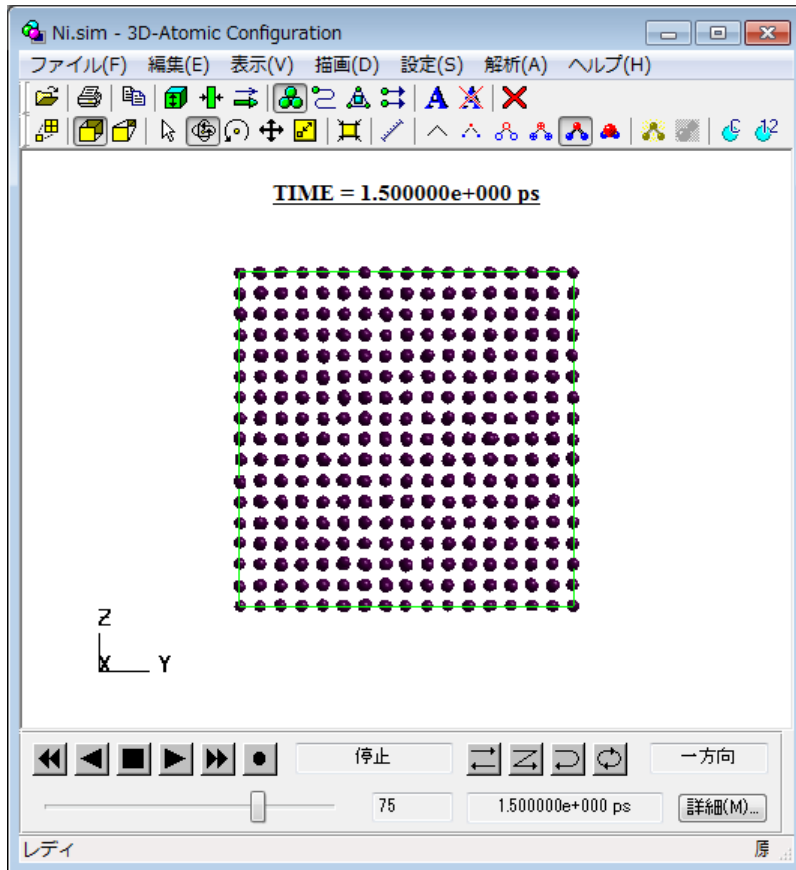
登録順に実行



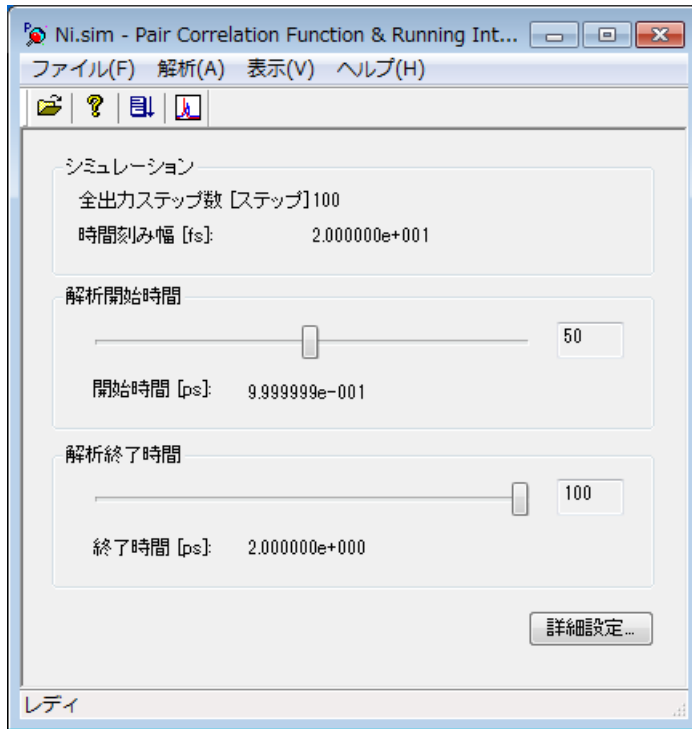


# 結果表示

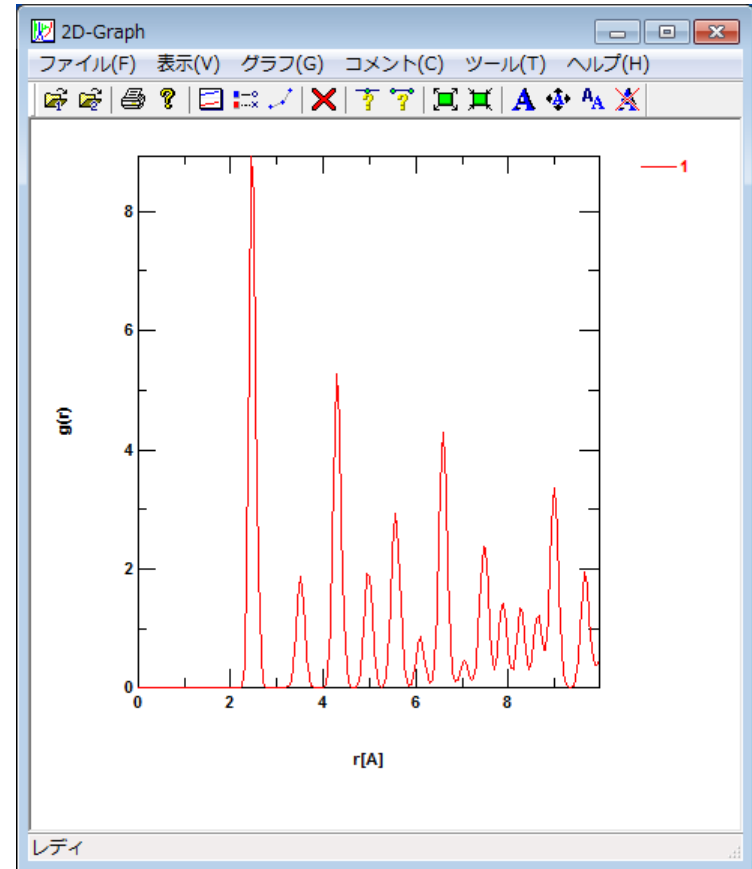
アニメーション表示、物性値の時間変化グラフなどの結果表示機能があります。



二体相関関数・積算配位数などの解析機能があります。

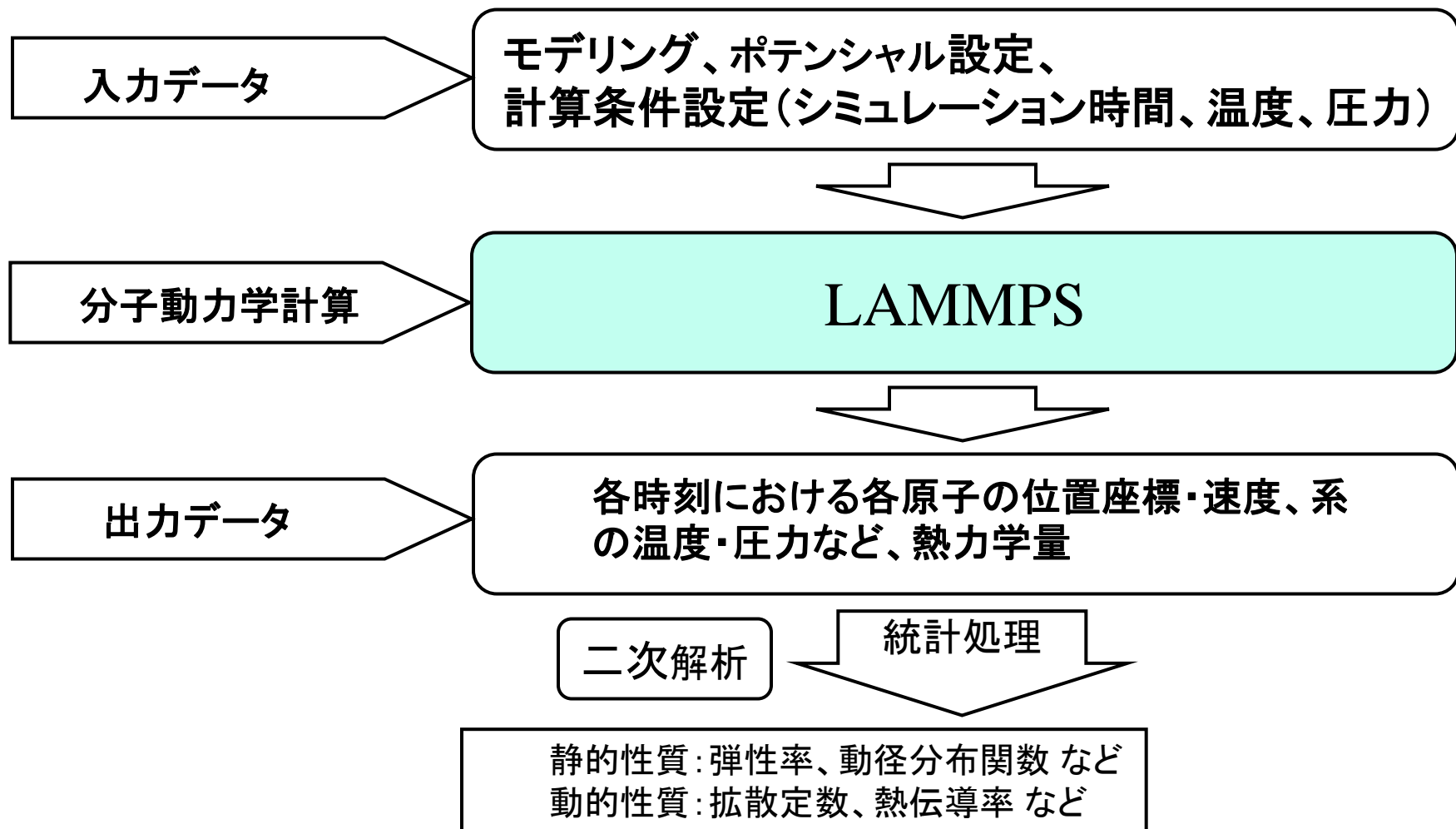


解析条件設定画面



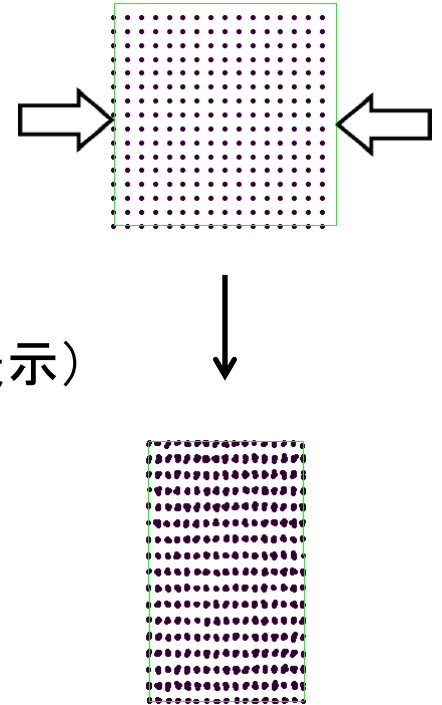
二体相関関数

# SCIGRESS ME 2.3 の LAMMPS 連携機能 体験実習



## Niの一軸応力誘起相転移の分子動力学シミュレーション

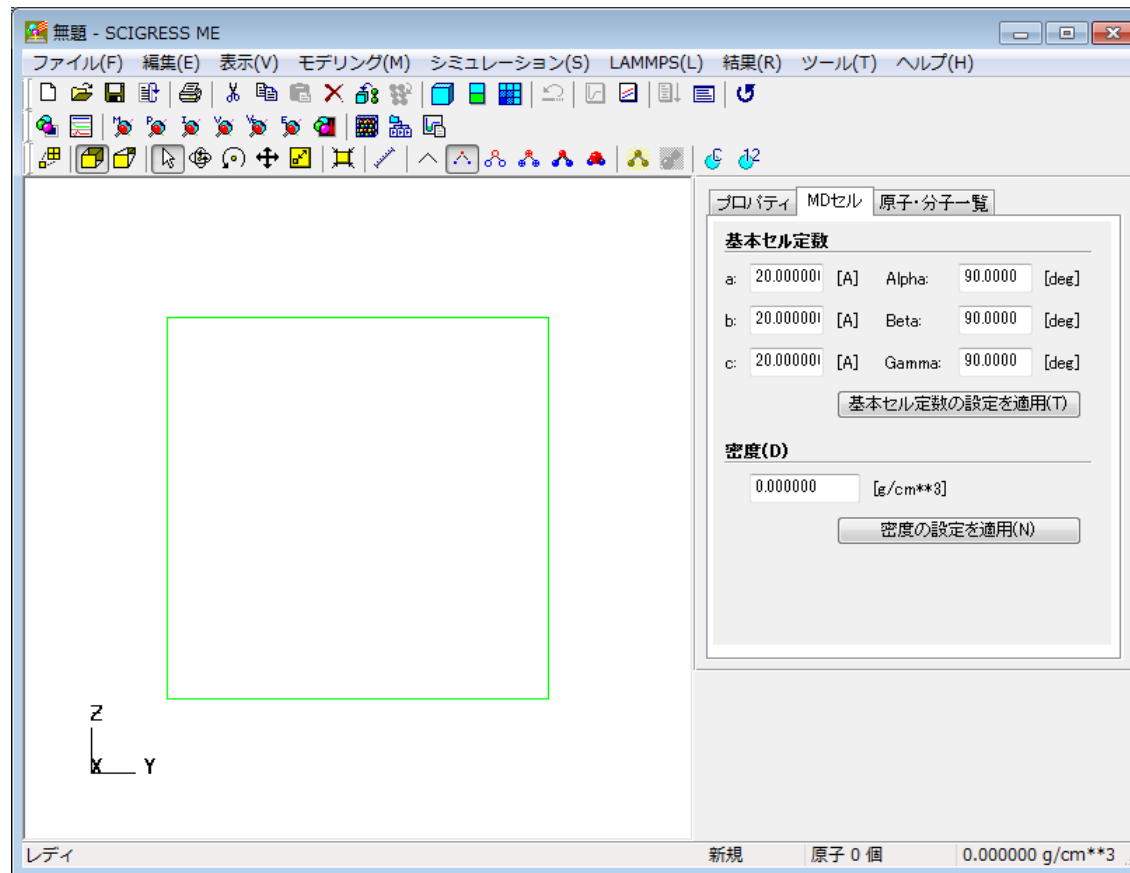
1. Ni 結晶のモデリング
2. 計算条件設定(無応力)
3. ポテンシャルの設定
4. 計算実行
5. 結果表示(アニメーション、温度等の時間変化グラフ表示)
6. リスタートデータの作成
7. リスタート計算条件設定(応力印加)
8. リスタート計算実行
9. リスタートデータの作成2
10. リスタート計算条件設定2(応力印加)
11. リスタート計算実行2
12. リスタート結果表示(アニメーション、温度等の時間変化グラフ表示)
13. 二体相関関数の算出



(参考)Parrinello and Rahman, J Appl Phys, 52, 7182 (1981)

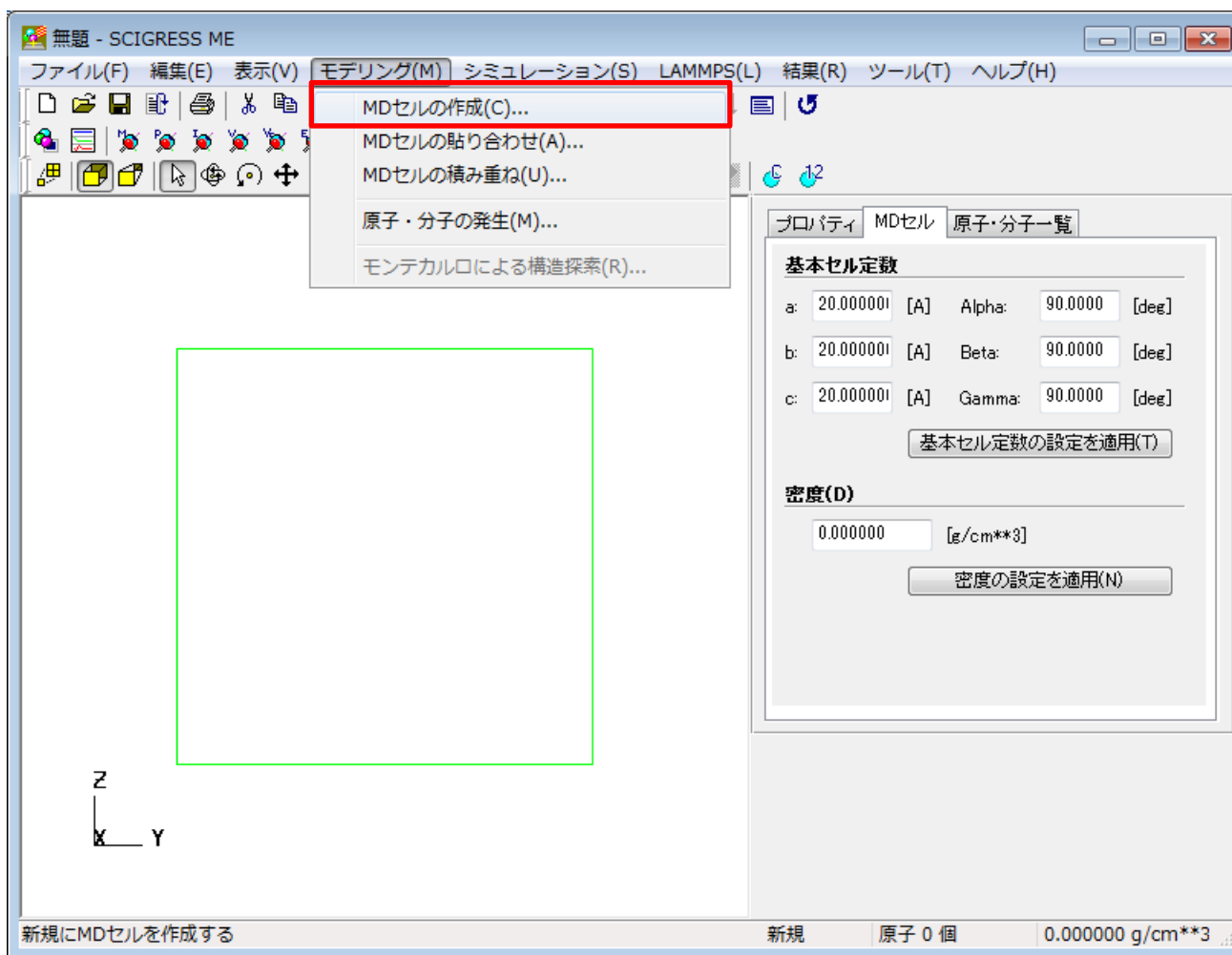
# SCIGRESS MEの起動

[スタート]メニューから  
[すべてのプログラム]→[SCIGRESS ME 2.3]→[SCIGRESS ME]  
の順に選択し、SCIGRESS MEを起動



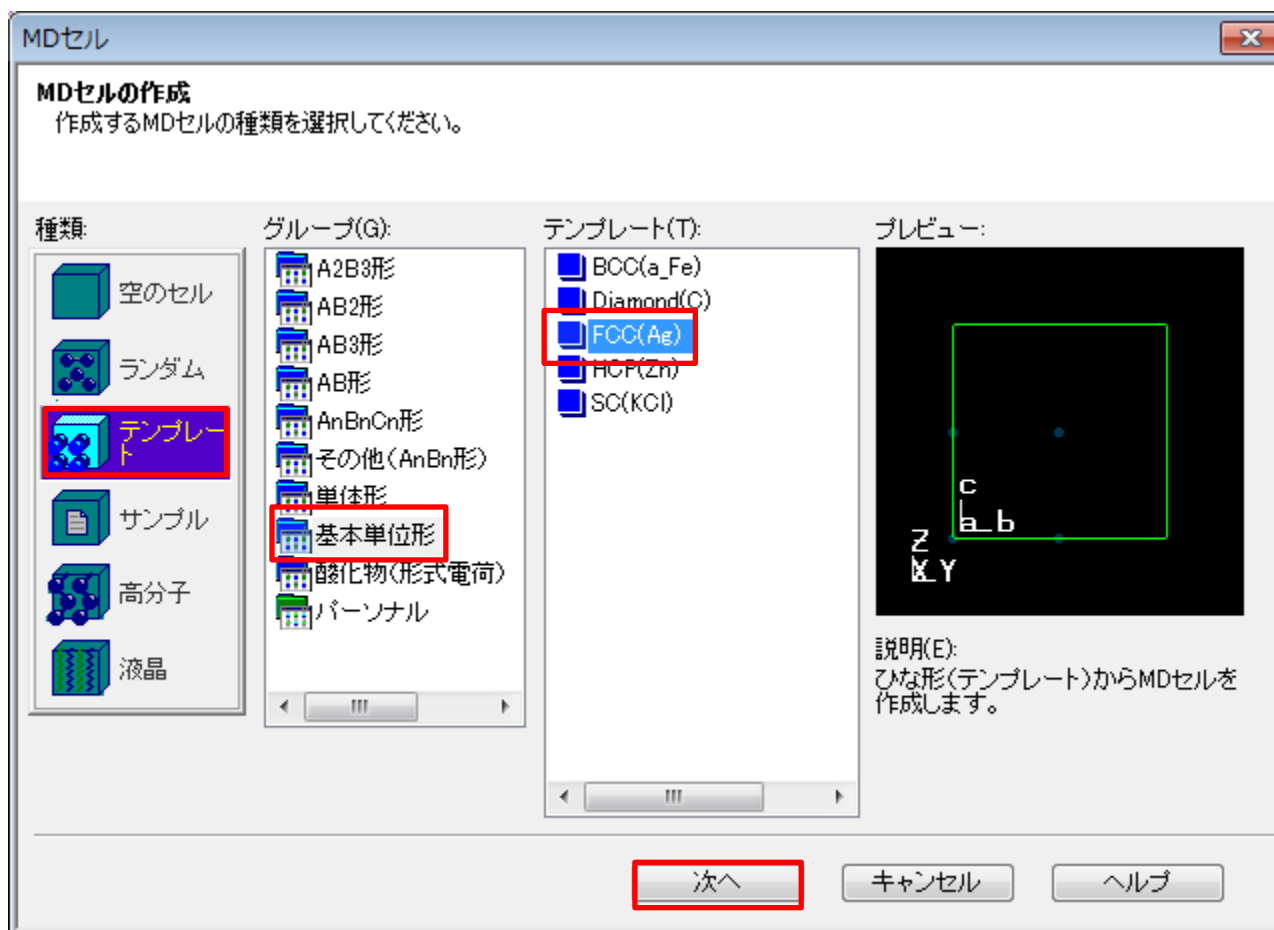
# モデルの作成

「モデリング」⇒「MDセルの作成」を選択



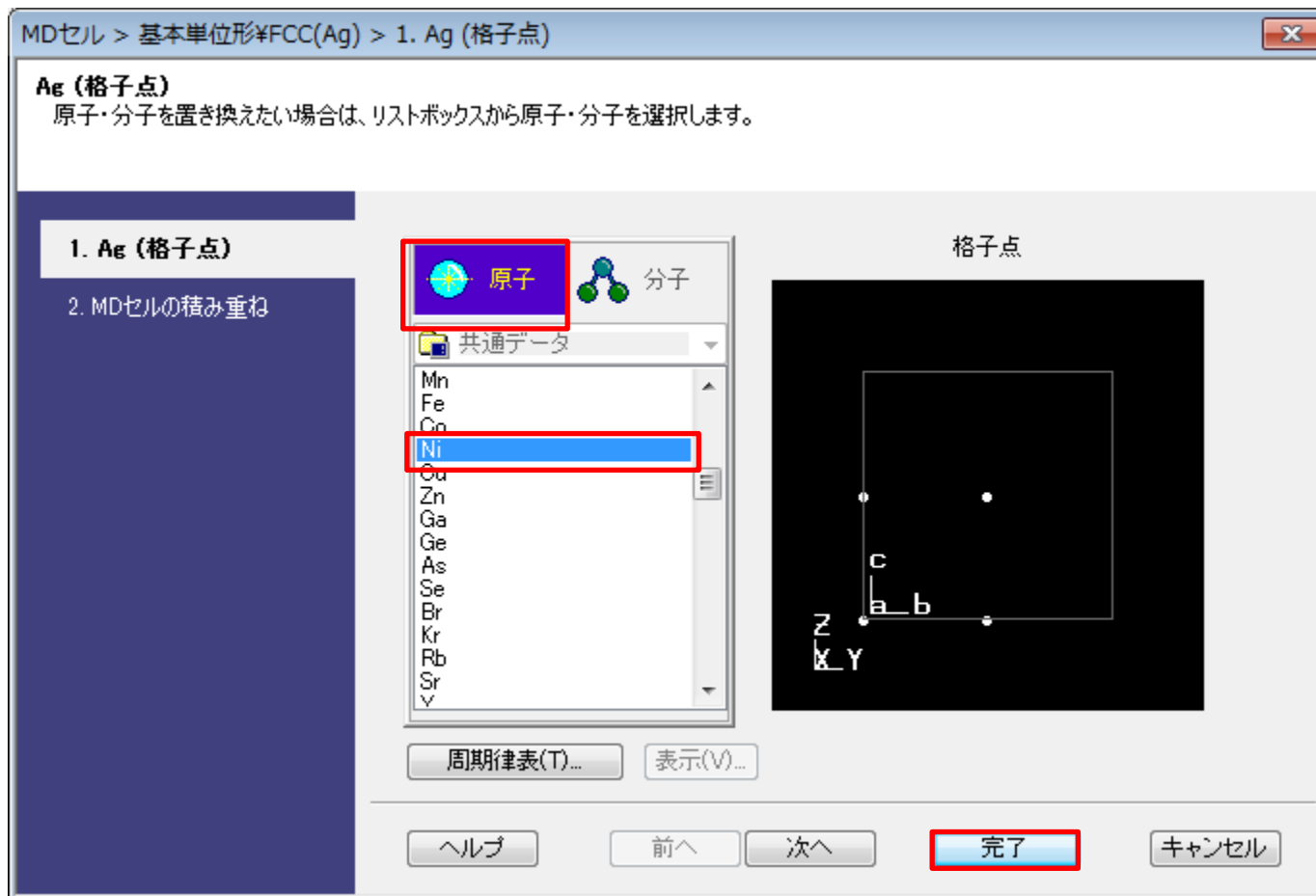
# モデルの作成

種類:「テンプレート」、グループ:「基本単位形」、テンプレート:「FCC(Ag)」を選択し、「次へ」をクリック

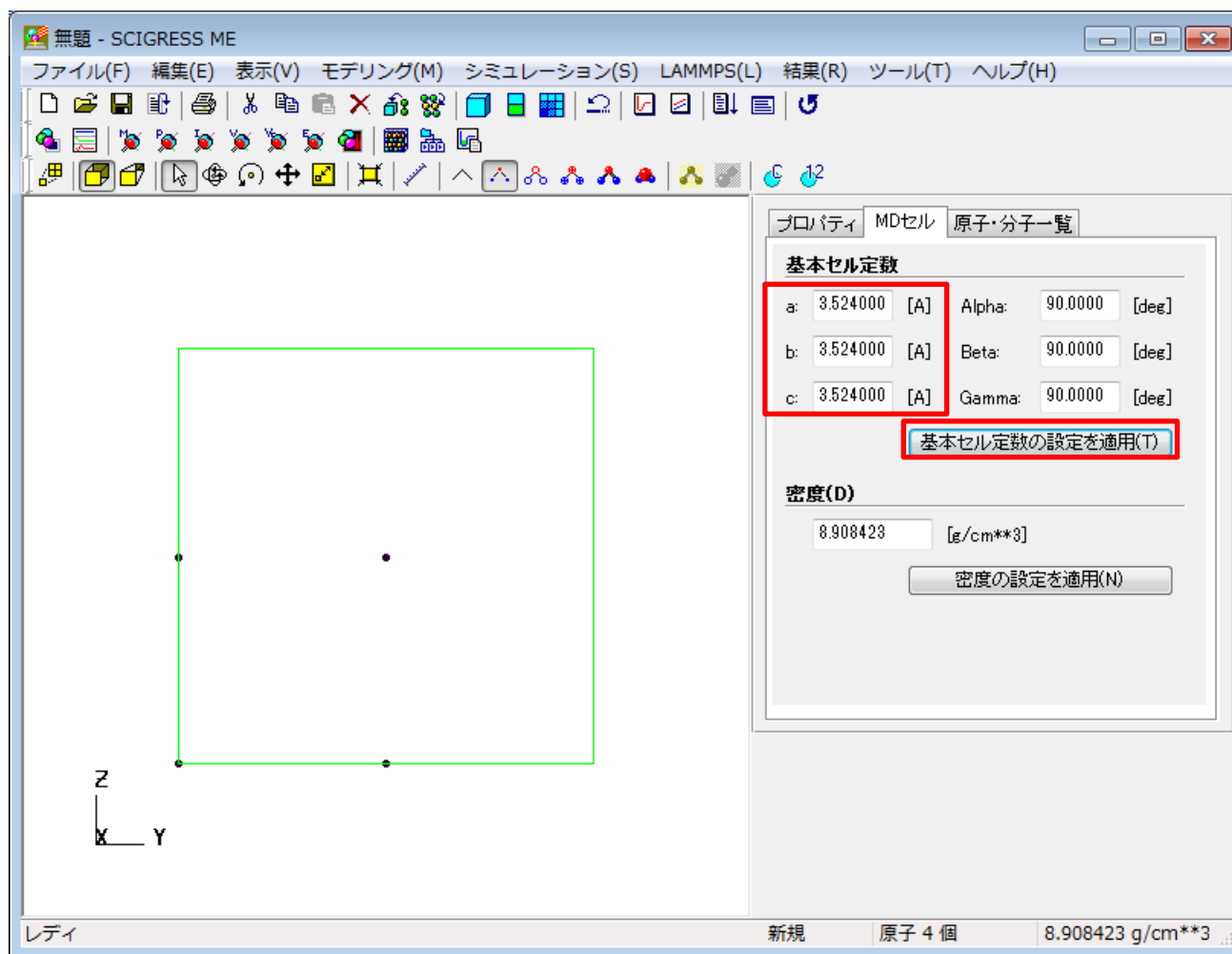




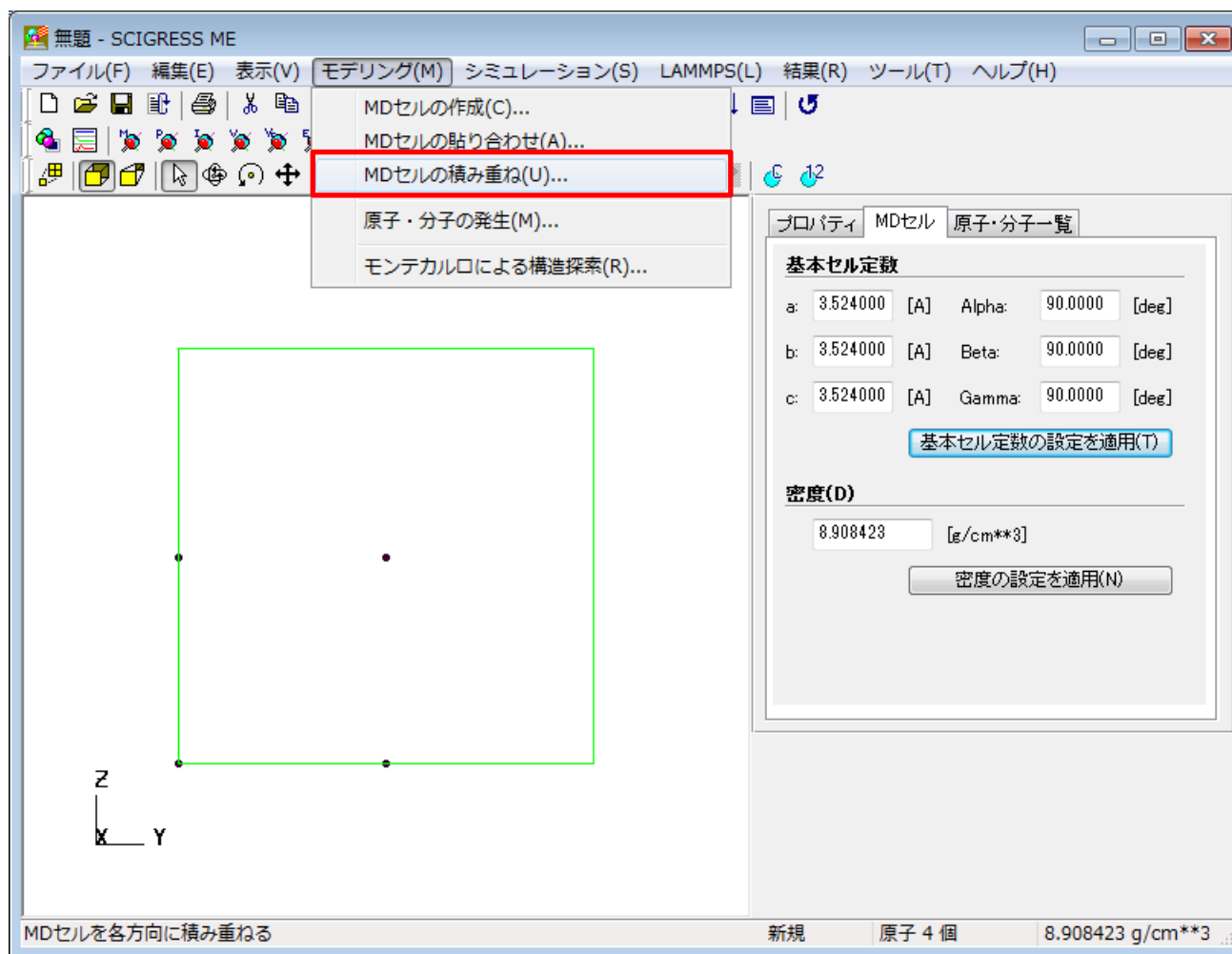
「原子」タブを選択し、リストから「Ni」を選択し、「完了」をクリック



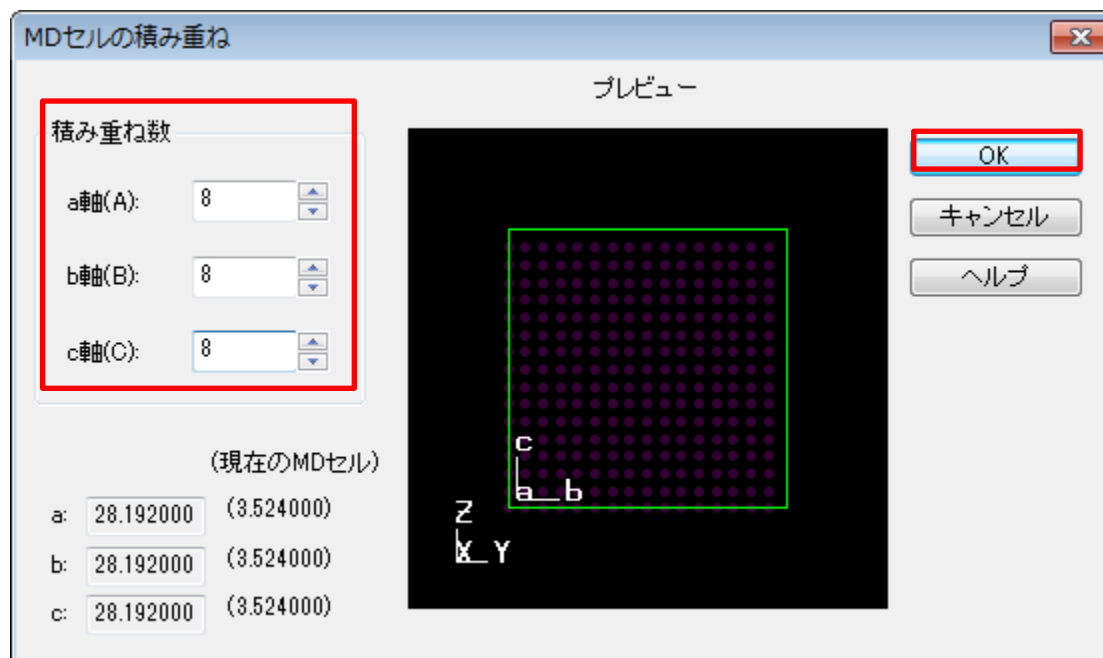
基本セル定数を $a=b=c=3.524$ に設定し、「基本セル定数の設定を適用」をクリック



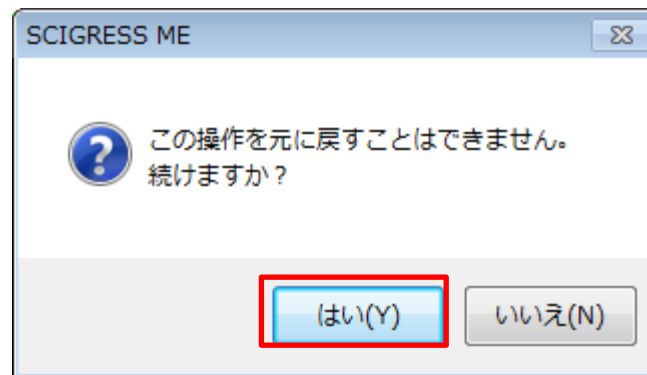
「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」を選択



積み重ね数をa軸=b軸=c軸=8に設定し、「OK」をクリック

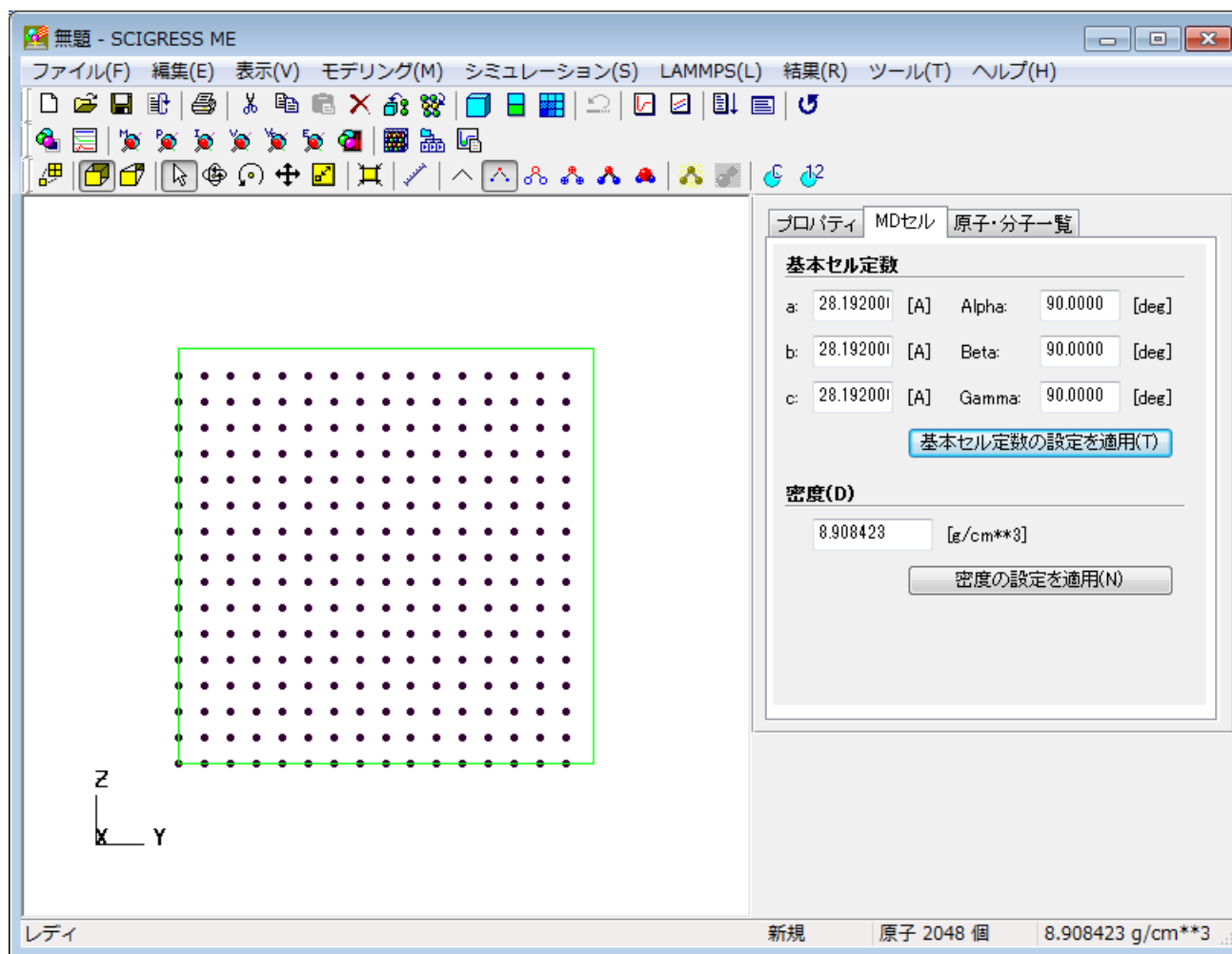


「はい」をクリック



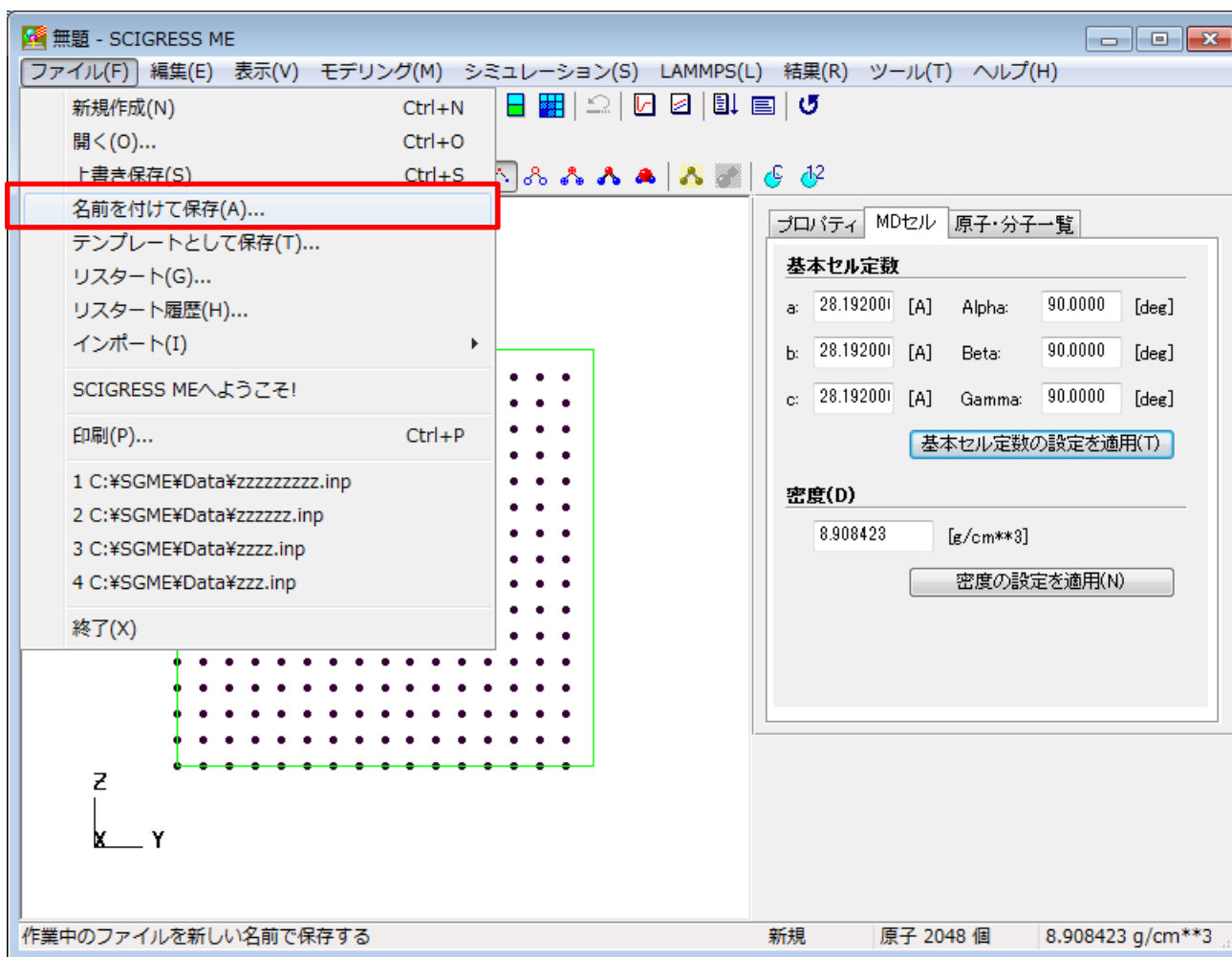
# モデルの作成

ユニットセルを $8 \times 8 \times 8$ に積み重ねたMDセルがメイン画面に表示される



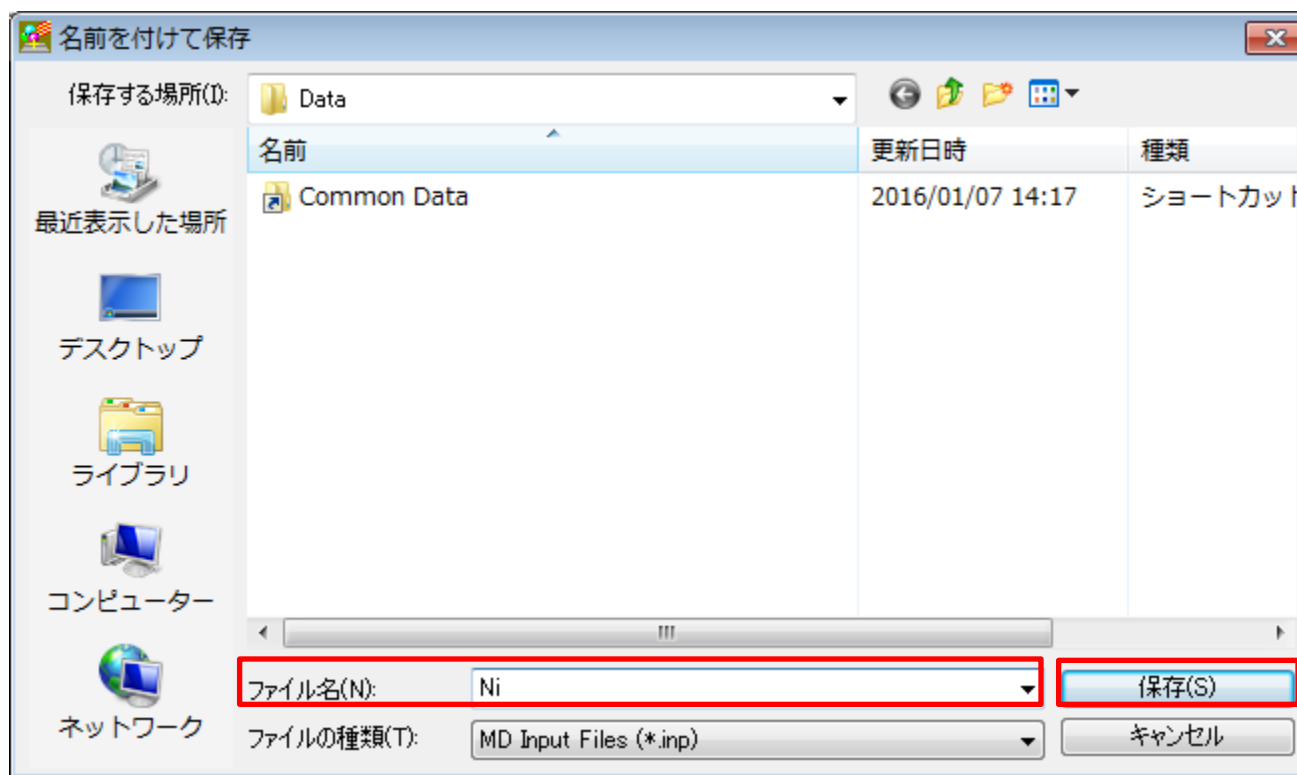
# モデルの作成

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」を選択



# モデルの作成

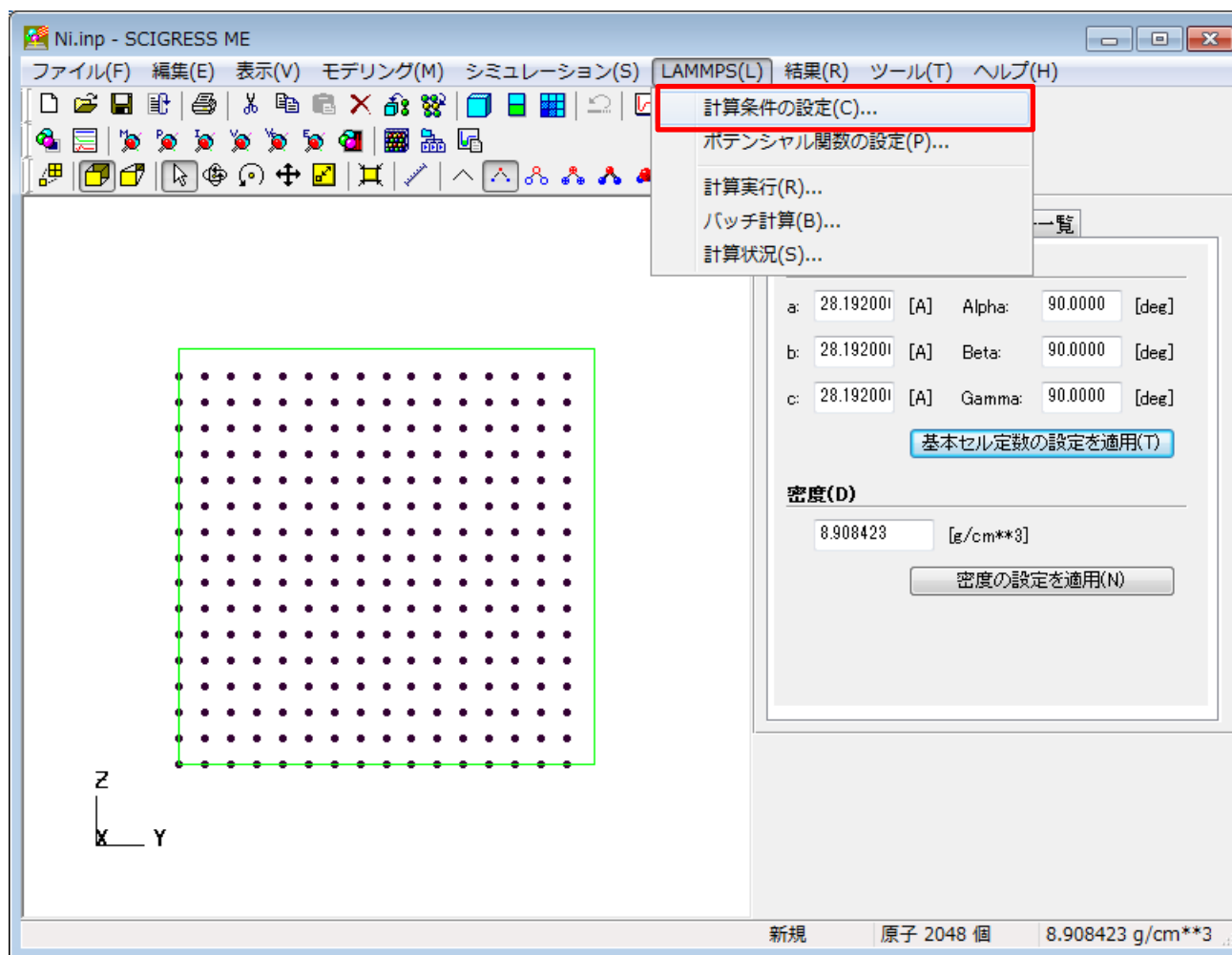
ファイル名 Niを入力し、「保存」をクリック





# 計算条件設定

「LAMMPS」⇒「計算条件の設定」を選択



# 計算条件設定

アンサンブル:**NTP**、総ステップ数:**10000**、時間刻み幅:**0.5**、出力間隔ステップ数:**100**、  
温度のDamp:**50**、圧力のDamp:**500**に設定し、「適用」、「OK」をクリック

時間刻み幅(0.5 fs)  
× 100 steps

時間刻み幅(0.5 fs)  
× 1000 steps

計算条件

基本設定 外場 オプション

アンサンブル

- NEV
- NTV
- NPH
- NTP

シミュレーション時間(X)

総ステップ数: 10000 [steps]

時間刻み幅: 0.5 [fs]

出力間隔ステップ数: 100 [steps]

出力ステップ数: 100 [steps]

境界条件

	Lower	Upper
X:	p	p
Y:	p	p
Z:	p	p

温度

Start: 298 [K]

End: 298 [K]

Damp: 50 [fs]

圧力

- tri
- aniso
- iso
- stress

Start: 1 [atm]

End: 1 [atm]

Damp: 500 [fs]

MDセル

- 一定
- 可変

ステップ間隔: 1 [steps]

remap: none

x: none [設定...]

y: none [設定...]

z: none [設定...]

xy: none [設定...]

xz: none [設定...]

yz: none [設定...]

OK キャンセル 適用(A) ヘルプ

引用元: [http://lammps.sandia.gov/doc/fix\\_nh.html](http://lammps.sandia.gov/doc/fix_nh.html)

## ・温度制御

The Tdamp parameter is specified in time units and determines how rapidly the temperature is relaxed.

**A good choice for many models is a Tdamp of around 100 timesteps.**  
Note that this is NOT the same as 100 time units for most units settings.

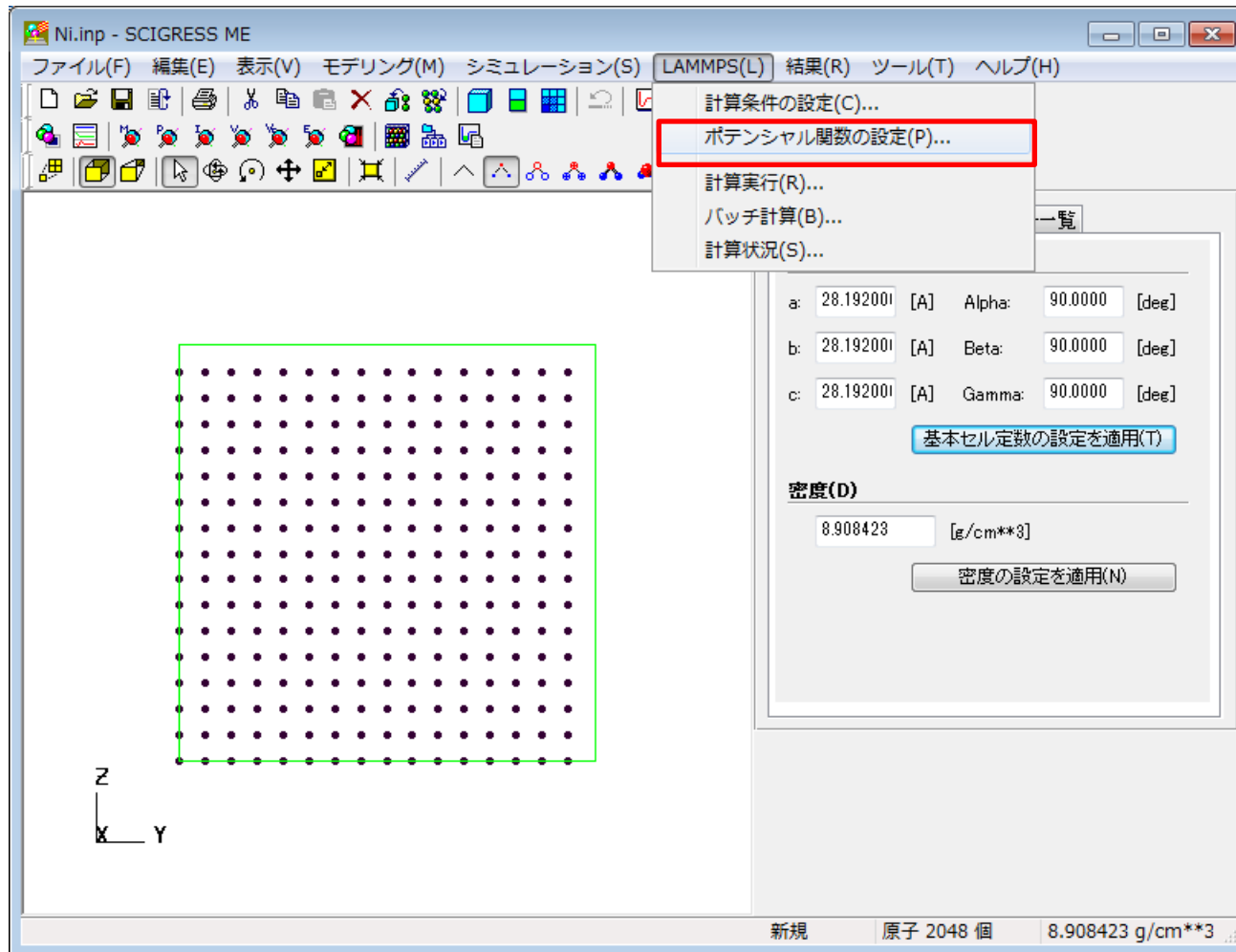
## ・圧力制御

the Pdamp parameter operates like the Tdamp parameter, determining the time scale on which pressure is relaxed.

**A good choice for many models is a Pdamp of around 1000 timesteps.**  
Note that this is NOT the same as 1000 time units for most units settings.

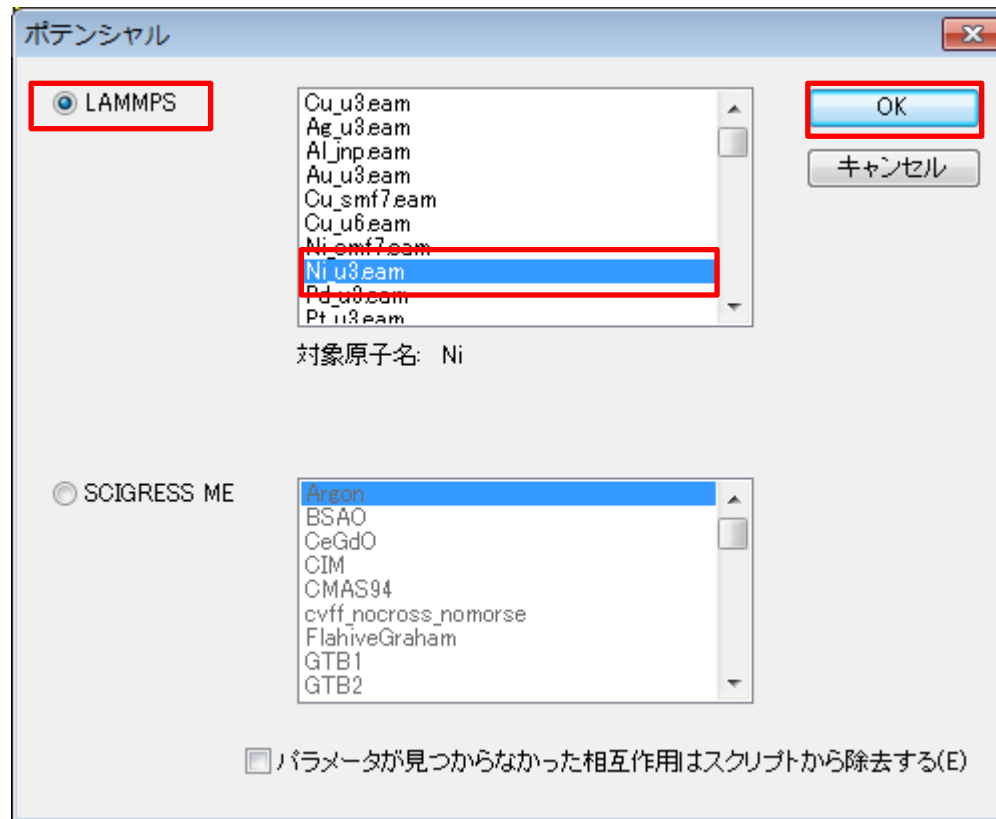
# ポテンシャルの設定

「LAMMPS」⇒「ポテンシャル関数の設定」を選択。



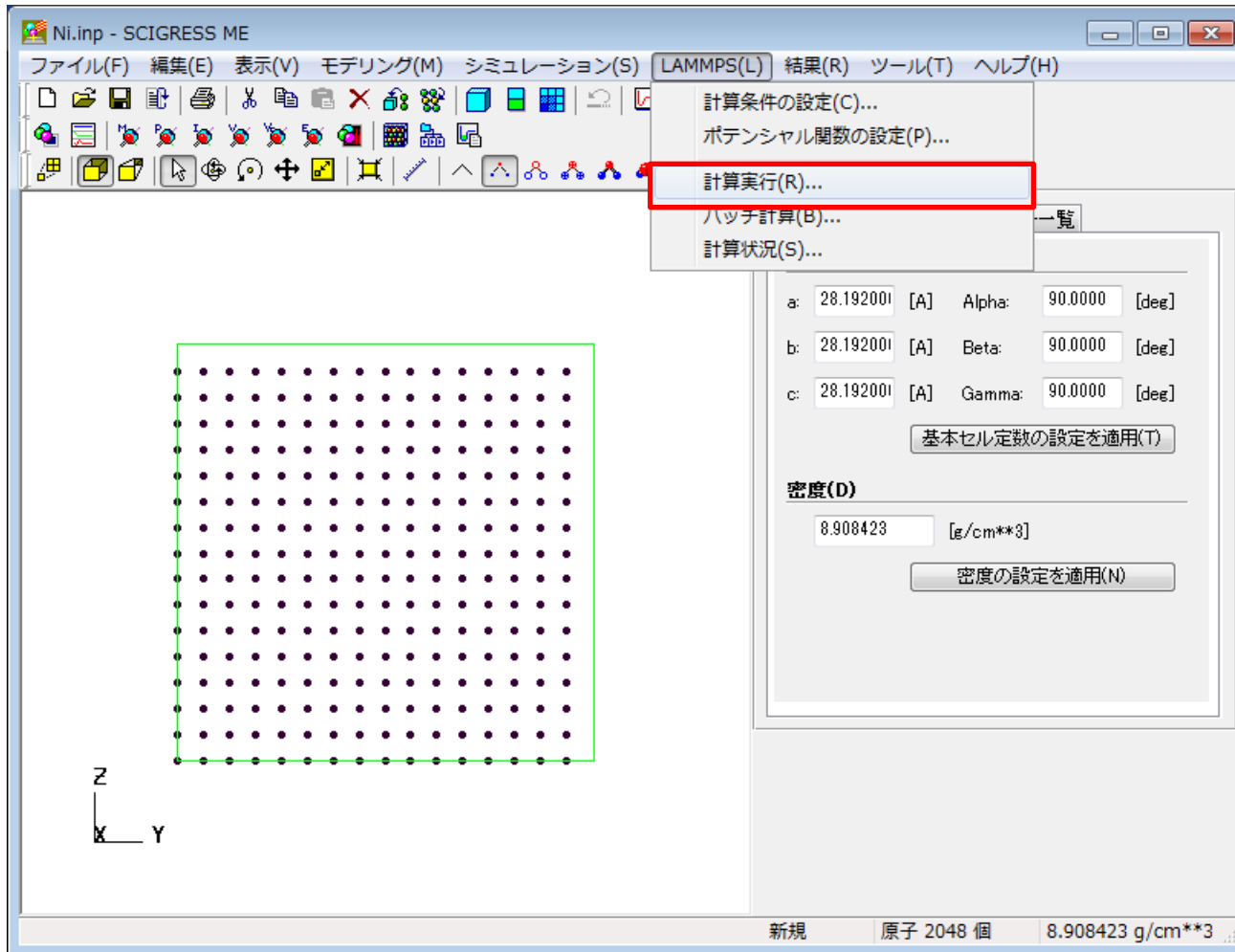
# ポテンシャルの設定

「LAMMPS」、「Ni\_u3.eam」を選択し、「OK」をクリック

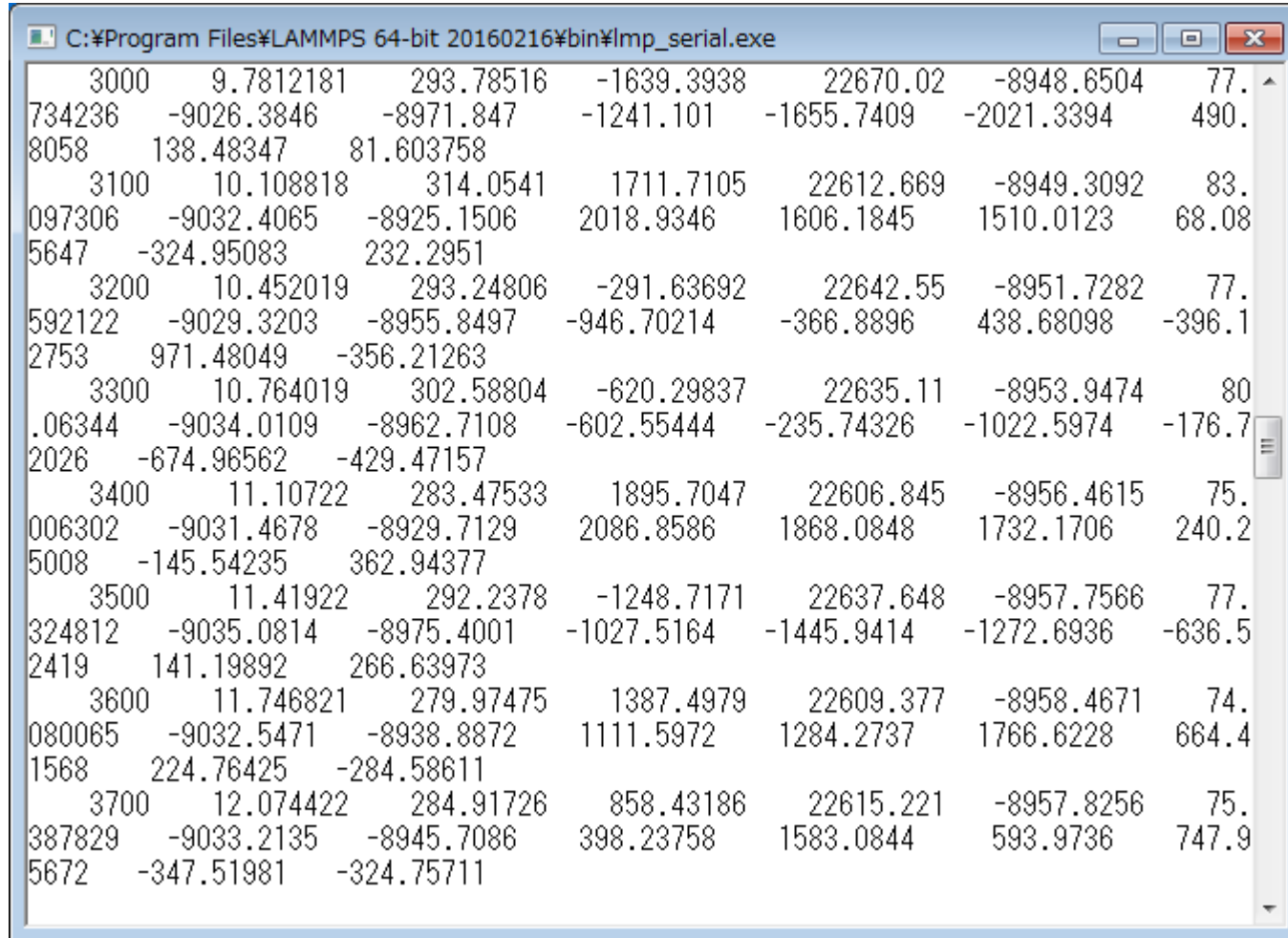


# 計算実行

「LAMMPS」⇒「計算実行」を選択。



## LAMMPSで分子動力学計算が実行されます



```
C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20160216\bin\lmp_serial.exe
 3000  9.7812181  293.78516 -1639.3938  22670.02 -8948.6504  77.
734236 -9026.3846 -8971.847 -1241.101 -1655.7409 -2021.3394  490.
8058  138.48347  81.603758
 3100  10.108818  314.0541  1711.7105  22612.669 -8949.3092  83.
097306 -9032.4065 -8925.1506  2018.9346  1606.1845  1510.0123  68.08
5647 -324.95083  232.2951
 3200  10.452019  293.24806 -291.63692  22642.55 -8951.7282  77.
592122 -9029.3203 -8955.8497 -946.70214 -366.8896  438.68098 -396.1
2753  971.48049 -356.21263
 3300  10.764019  302.58804 -620.29837  22635.11 -8953.9474  80
.06344 -9034.0109 -8962.7108 -602.55444 -235.74326 -1022.5974 -176.7
2026 -674.96562 -429.47157
 3400  11.10722  283.47533  1895.7047  22606.845 -8956.4615  75.
006302 -9031.4678 -8929.7129  2086.8586  1868.0848  1732.1706  240.2
5008 -145.54235  362.94377
 3500  11.41922  292.2378 -1248.7171  22637.648 -8957.7566  77.
324812 -9035.0814 -8975.4001 -1027.5164 -1445.9414 -1272.6936 -636.5
2419  141.19892  266.63973
 3600  11.746821  279.97475  1387.4979  22609.377 -8958.4671  74.
080065 -9032.5471 -8938.8872  1111.5972  1284.2737  1766.6228  664.4
1568  224.76425 -284.58611
 3700  12.074422  284.91726  858.43186  22615.221 -8957.8256  75.
387829 -9033.2135 -8945.7086  398.23758  1583.0844  593.9736  747.9
5672 -347.51981 -324.75711
```

# 結果表示

ログを確認し、「OK」をクリック

計算時間



計算状況

ログ(L):

9700	29.390452	301.15085	1473.8652	22610.379	-8953.4046	79.683165
9800	29.686852	293.12328	361.20021	22625.544	-8954.6262	77.559107
9900	29.998853	297.95693	-1434.3041	22642.442	-8955.4873	78.838069
10000	30.310854	298.27745	1176.5334	22607.025	-8956.0952	78.922877

Loop time of 30.3109 s on 1 procs for 10000 steps with 2048 atoms

Performance: 14.252 ns/day, 1.684 hours/ns, 329.915 timesteps/s  
99.7% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

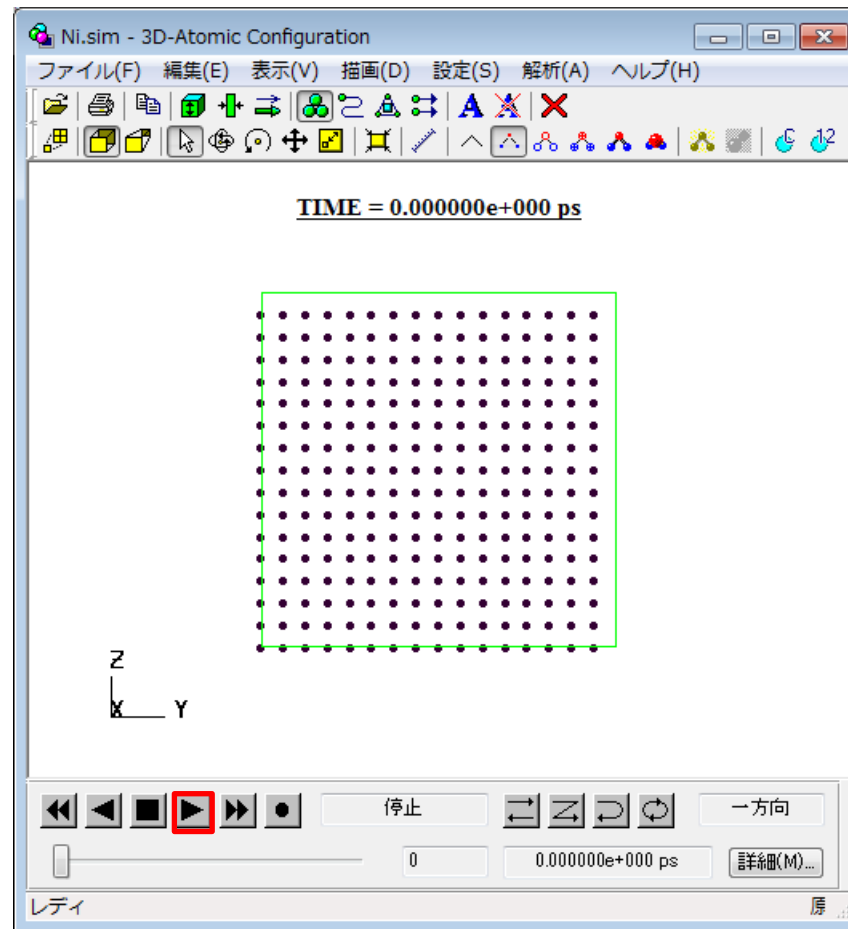
Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	28.018	28.018	28.018	0.0	92.43
Bond	0	0	0	0.0	0.00
Neigh	0.0156	0.0156	0.0156	0.0	0.05
Comm	0.2028	0.2028	0.2028	0.0	0.67
Output	1.0452	1.0452	1.0452	0.0	3.45
Modify	0.9516	0.9516	0.9516	0.0	3.14
Other		0.078			0.26

Nlocal: 2048 ave 2048 max 2048 min  
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0  
Nghost: 4035 ave 4035 max 4035 min  
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0  
Neighs: 136486 ave 136486 max 136486 min  
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

OK

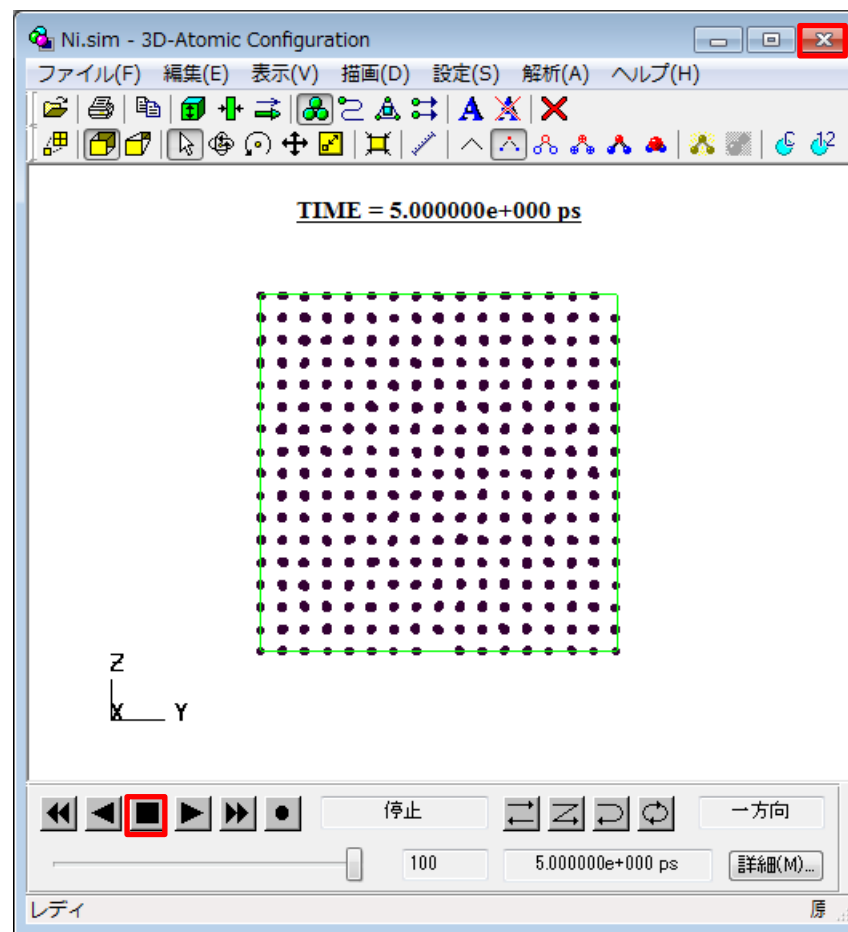


- ▶ をクリックし、アニメーションを実行します

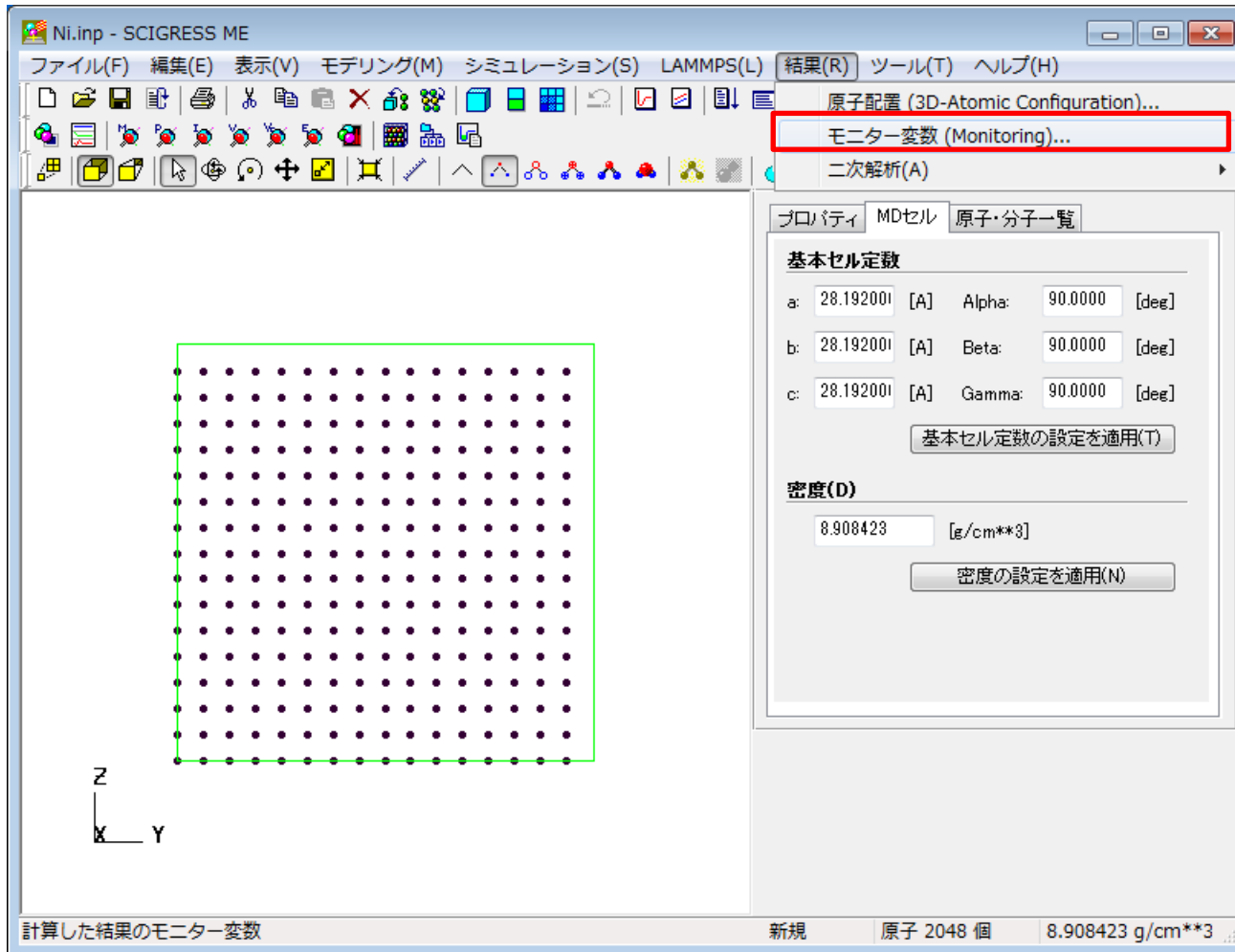


# 結果表示

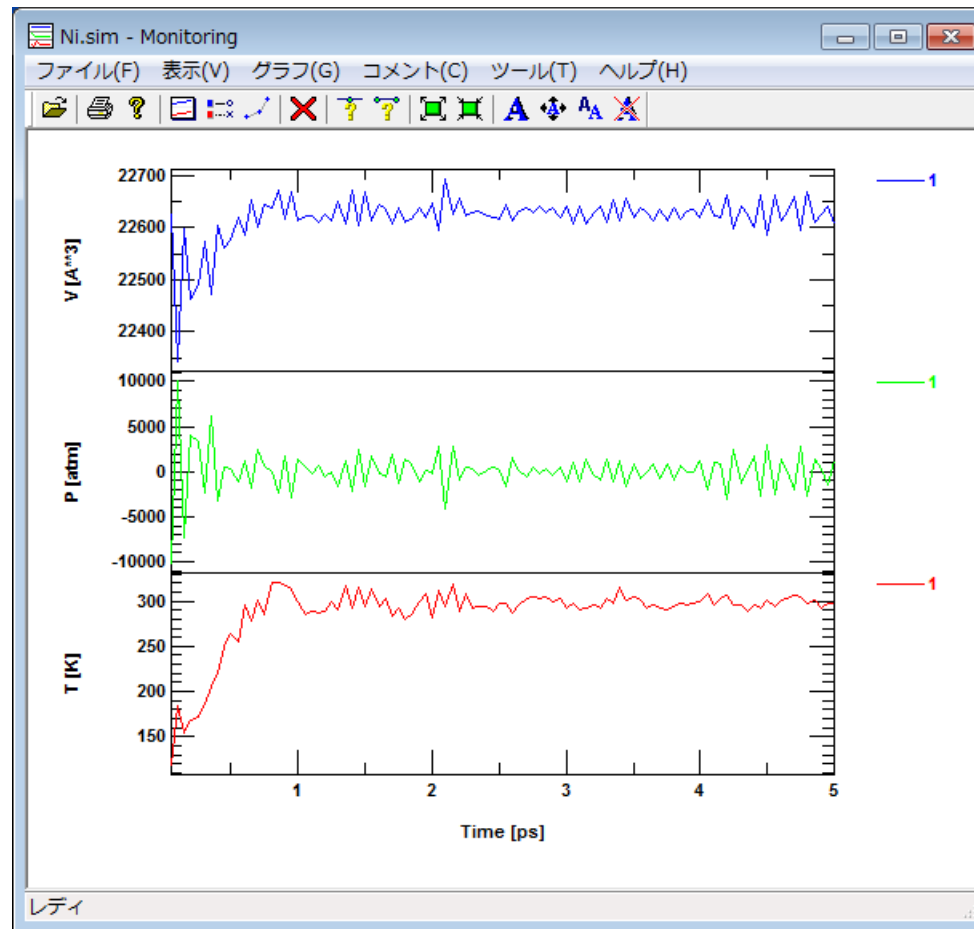
 をクリックし、アニメーションを停止し、 をクリックしてウインドウを閉じます



「結果」⇒「モニター変数」を選択

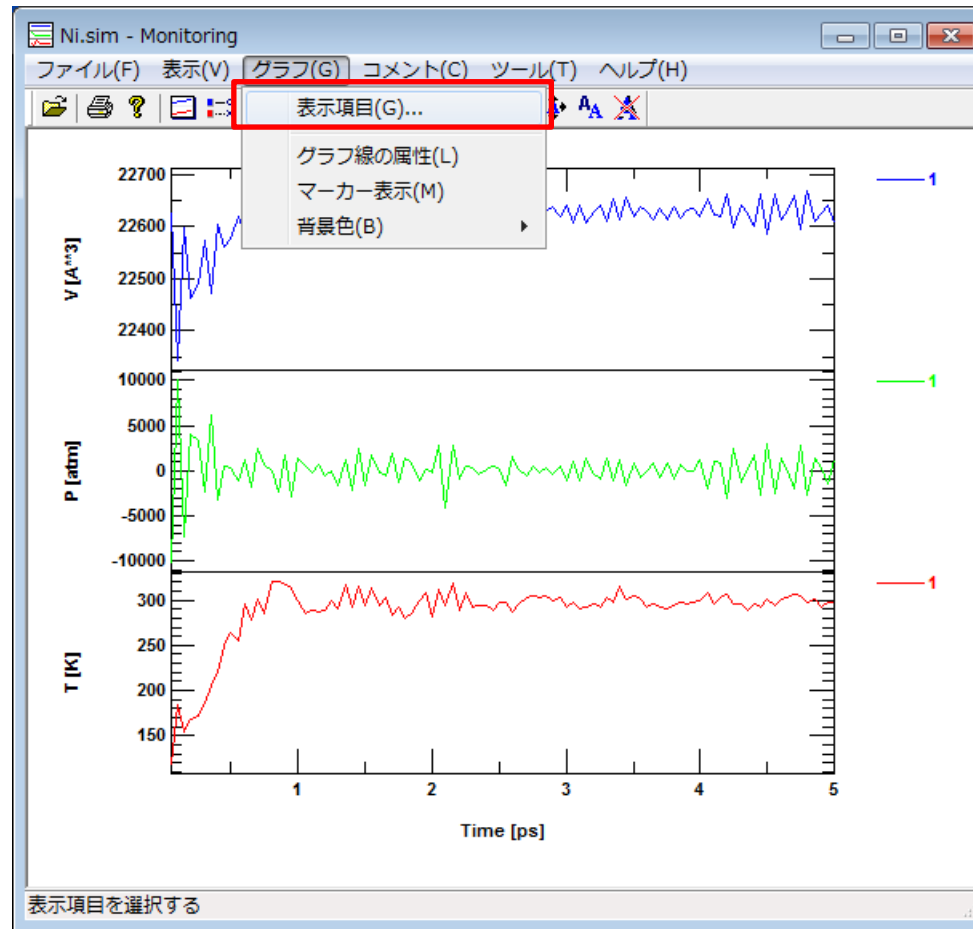


温度、圧力、体積の時間変化のグラフが表示されます



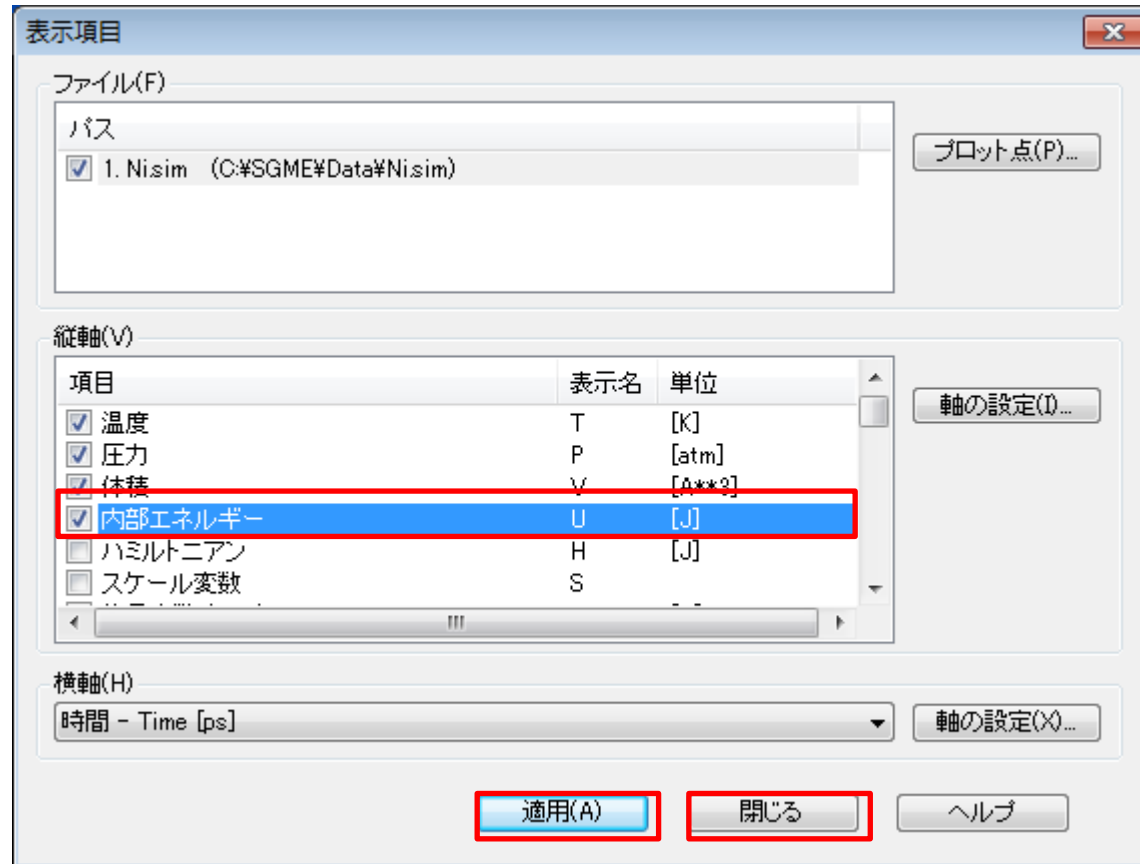
# 結果表示

「グラフ」⇒「表示項目」を選択



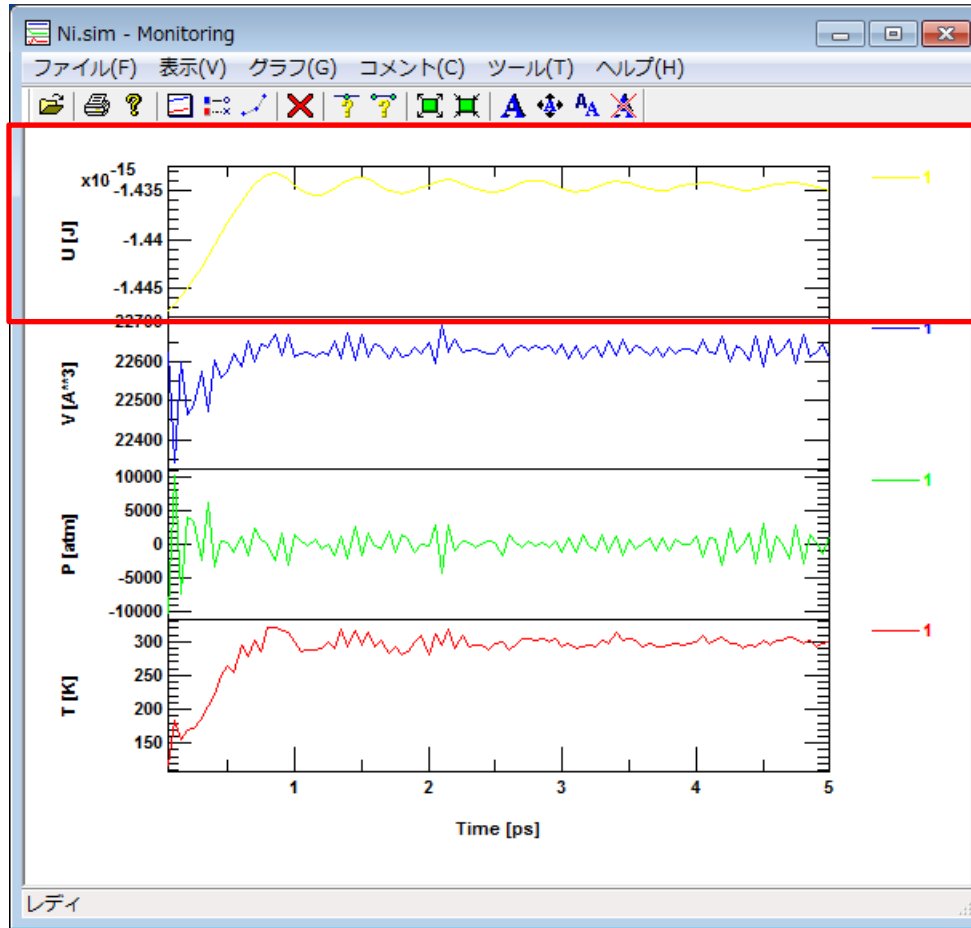
# 結果表示

「内部エネルギー」にチェックを入れ、「適用」、「閉じる」をクリック



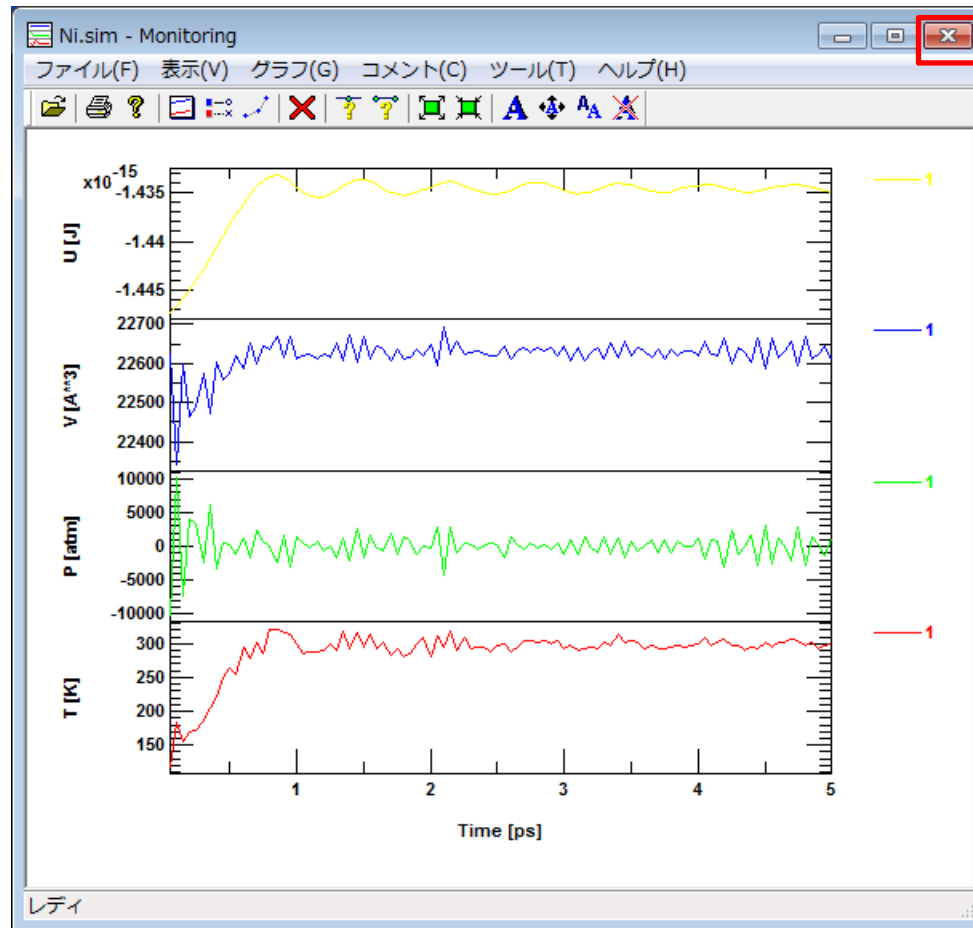
# 結果表示

内部エネルギーの時間変化のグラフが追加表示されます



# 結果表示

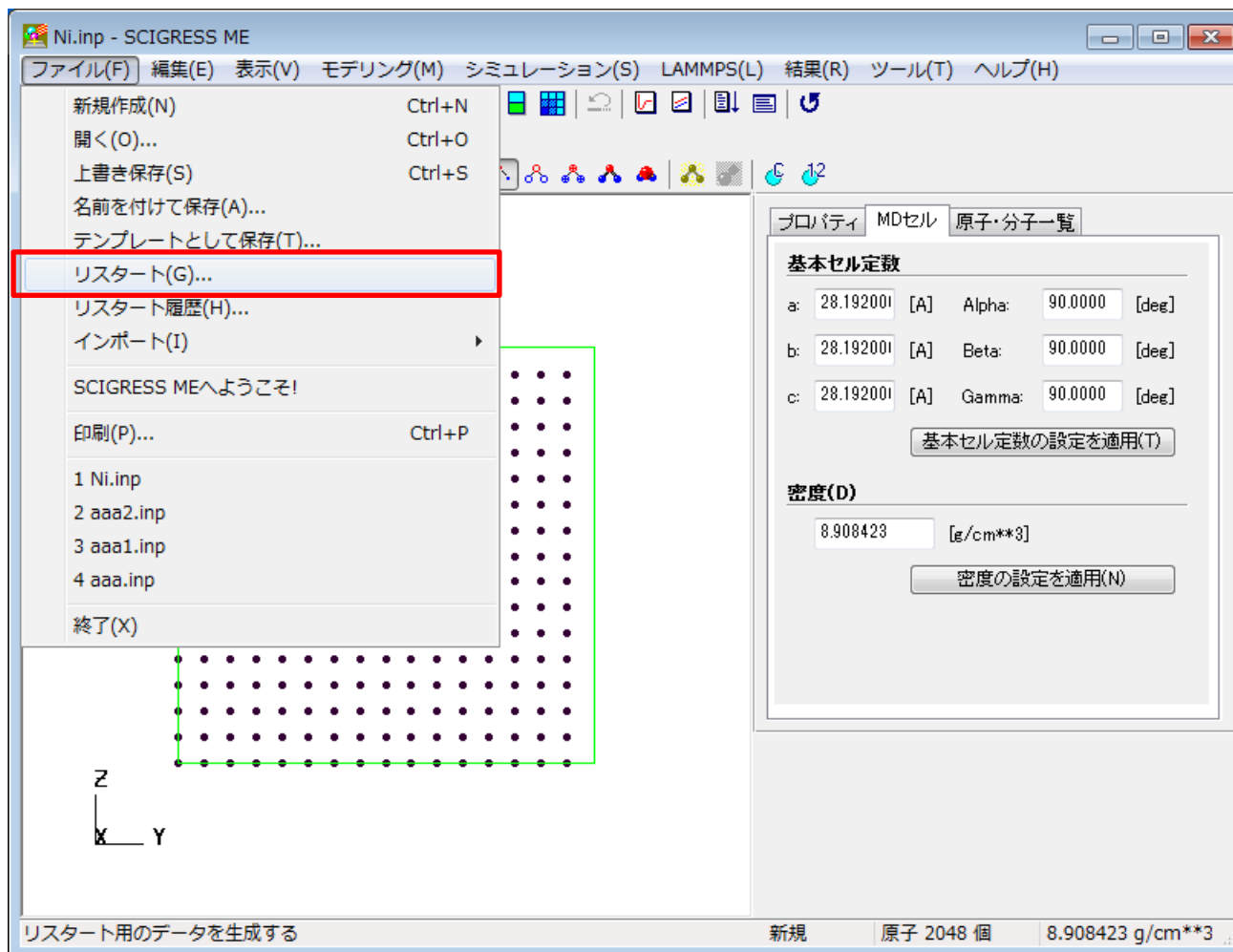
✕ をクリックしてウインドウを閉じます





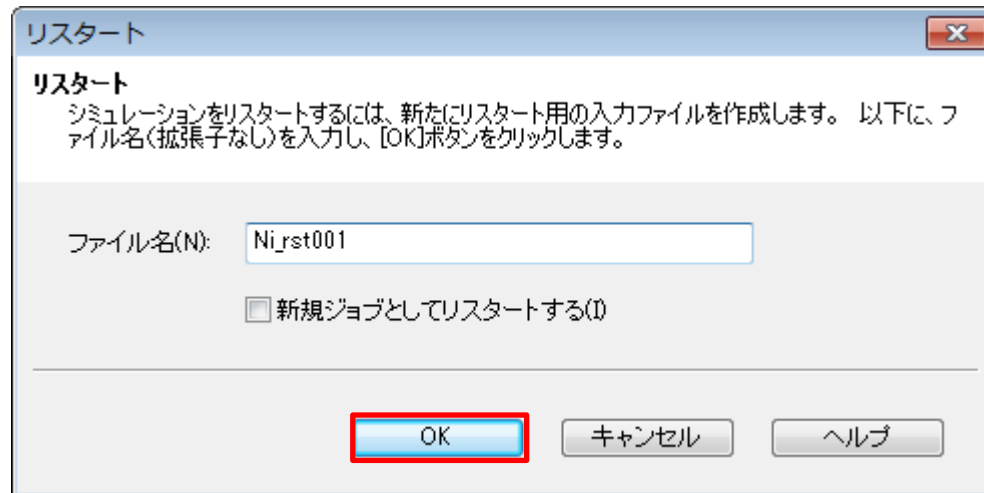
# リスタートデータの作成1

「ファイル」⇒「リスタート」を選択



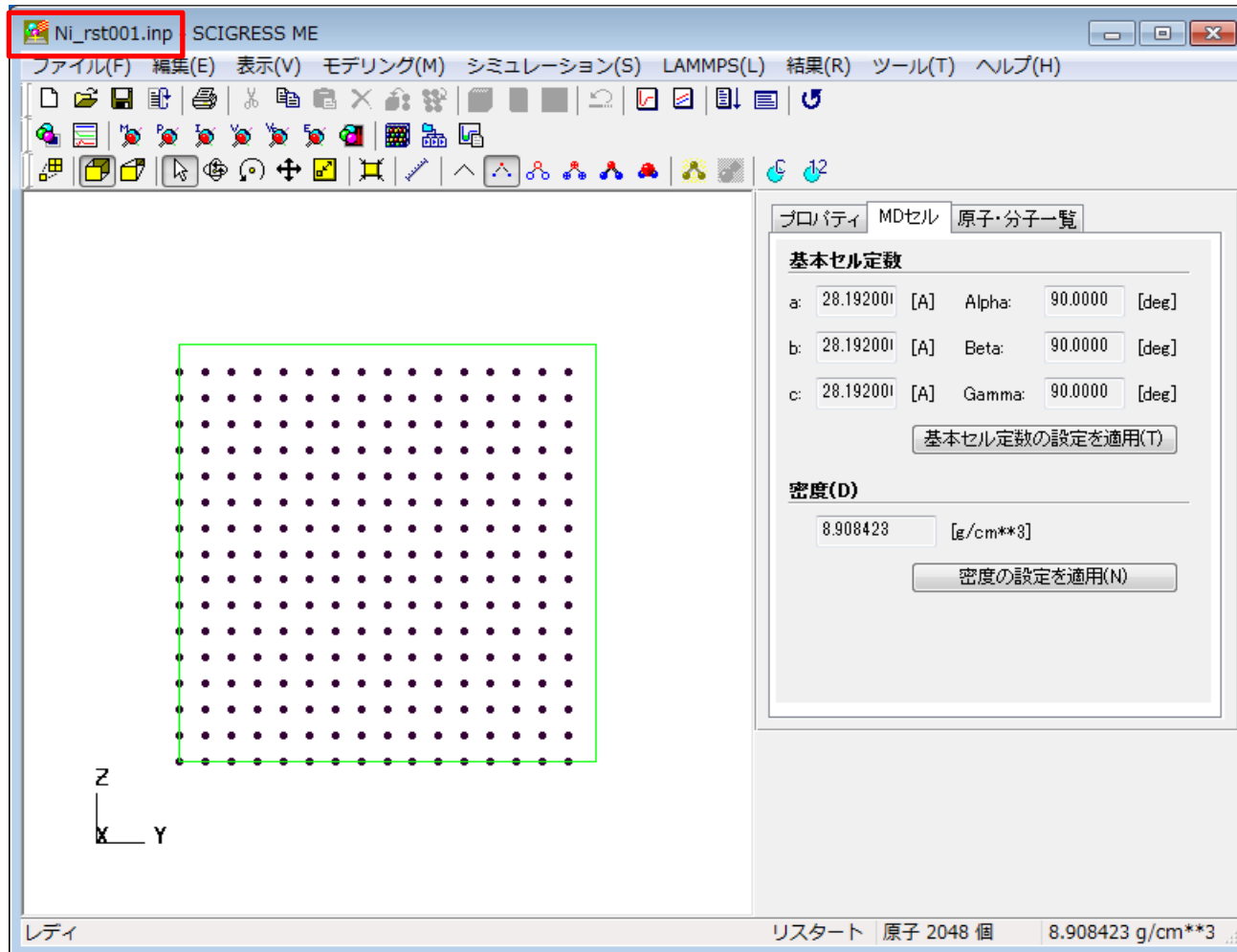
# リスタートデータの作成1

「OK」をクリック



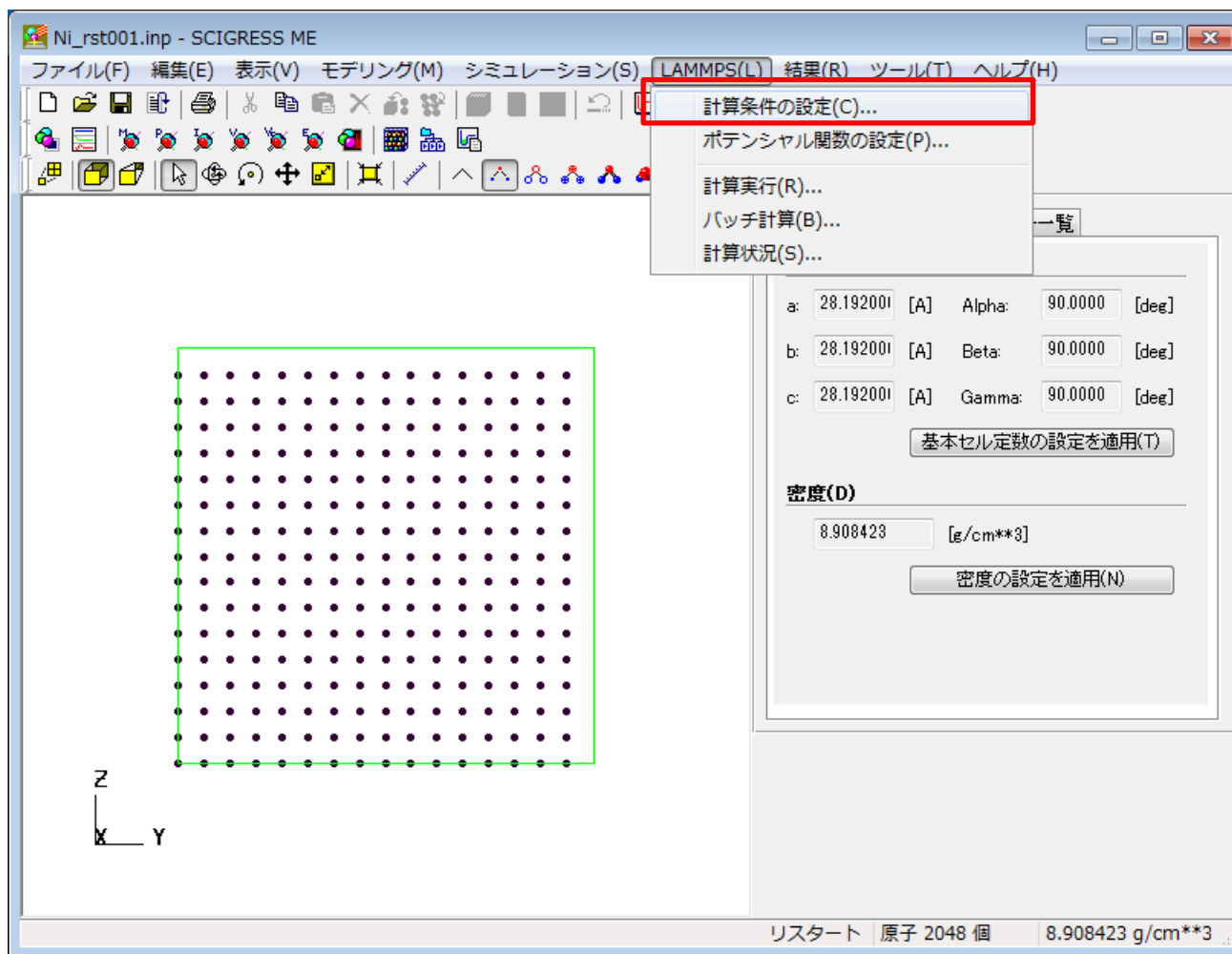
# リスタートデータの作成1

リスタートデータが生成されます



# リスタートデータの作成1

「LAMMPS」⇒「計算条件の設定」を選択



# リスタートデータの作成1

アンサンブル:「**NPH**」、圧力:「**stress**」に設定し、「設定」をクリック

計算条件

基本設定 外場 オプション

アンサンブル

- NEV
- NTV
- NPH**
- NTP

シミュレーション時間(X)

総ステップ数: 10000 [steps]

時間刻み幅: 0.5 [fs]

出力間隔ステップ数: 100 [steps]

出力ステップ数: 100 [steps]

境界条件

	Lower	Upper
X:	p	p
Y:	p	p
Z:	p	p

温度

Start: 298 [K]

End: 298 [K]

Damp: 50 [fs]

圧力

- tri Start: 1 [atm]
- aniso End: 1 [atm]
- iso Damp: 500 [fs]
- stress**

設定...

MDセル

- 一定 ステップ間隔: 1 [steps]
- 可変 remap: none

x: none 設定...

y: none 設定...

z: none 設定...

xy: none 設定...

xz: none 設定...

yz: none 設定...

OK キャンセル 適用(A) ヘルプ

# リスタートデータの作成1

Y欄でStart: **30000**、End: **30000**、Damp: **500**に設定し、「OK」をクリック

The image shows a 'Stress' dialog box with a grid of input fields for different axes. The Y-axis settings are highlighted with a red box. The 'OK' button is also highlighted with a red box.

Axis	Start	End	Damp
X	0 [atm]	0 [atm]	1000 [fs]
Y	30000 [atm]	30000 [atm]	500 [fs]
Z	0 [atm]	0 [atm]	1000 [fs]
XY	0 [atm]	0 [atm]	1000 [fs]
XZ	0 [atm]	0 [atm]	1000 [fs]
YZ	0 [atm]	0 [atm]	1000 [fs]

# リスタートデータの作成1

「適用」、「OK」をクリック

計算条件

基本設定 外場 オプション

アンサンブル

- NEV
- NTV
- NPH
- NTP

シミュレーション時間(X)

総ステップ数: 10000 [steps]

時間刻み幅: 0.5 [fs]

出力間隔ステップ数: 100 [steps]

出力ステップ数: 100 [steps]

境界条件

	Lower	Upper
X:	p	p
Y:	p	p
Z:	p	p

温度

Start: 298 [K]

End: 298 [K]

Damp: 50 [fs]

圧力

- tri Start: 1 [atm]
- aniso End: 1 [atm]
- iso Damp: 500 [fs]
- stress

設定...

MDセル

- 一定 ステップ間隔: 1 [steps]
- 可変 remap: none

x: none 設定...

y: none 設定...

z: none 設定...

xy: none 設定...

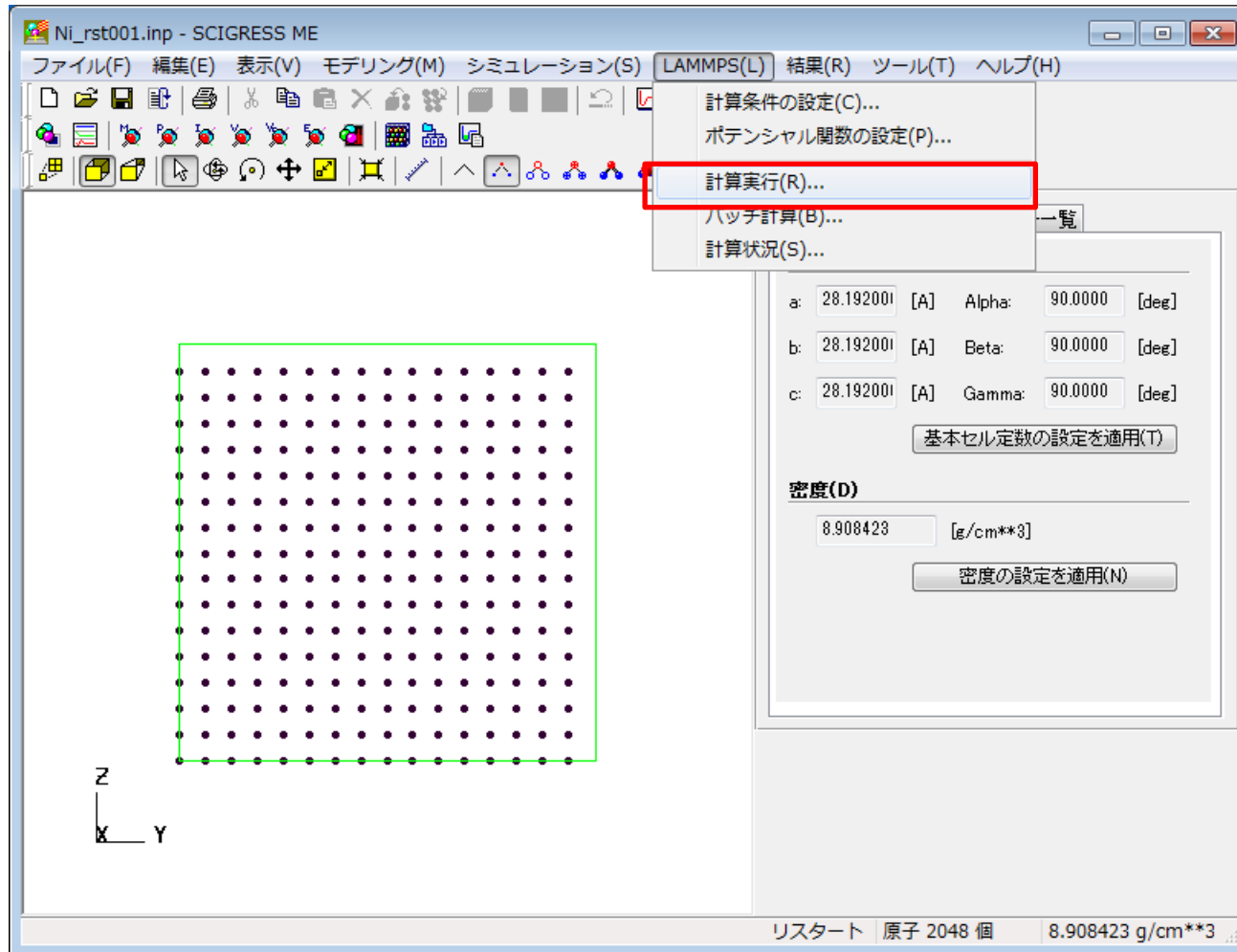
xz: none 設定...

yz: none 設定...

OK キャンセル 適用(A) ヘルプ

# リスタート計算の実行1

「LAMMPS」⇒「計算実行」をクリック





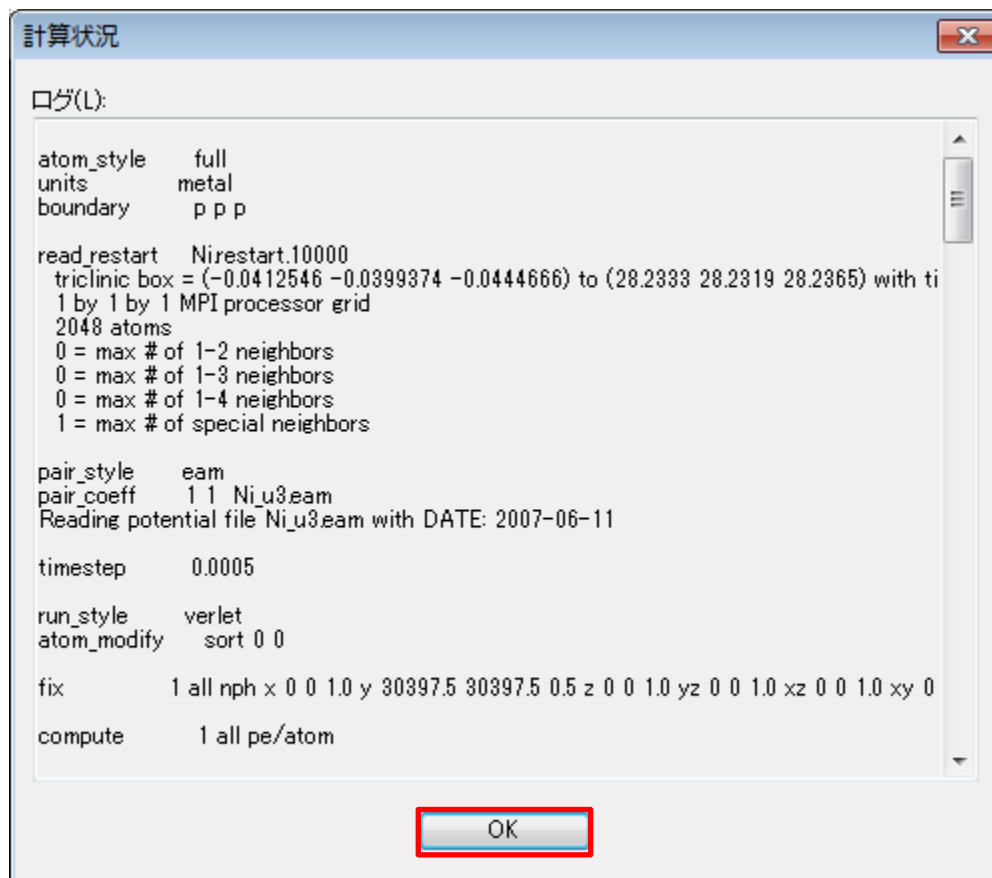
# リスタート計算の実行1

LAMMPSでリスタート計算が実行されます

```
C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20160216\bin\lmp_serial.exe
 12700   9.5628171   297.38803   9499.1005   22517.543  -8948.1007   78.
687541  -9026.7883   -8814.5971   18.612375   28921.818  -443.12846  -28.37
2455    79.705266   201.60496
 12800   9.9060171   296.00619   9245.3427   22522.47   -8948.1764   78.
321912  -9026.4983   -8818.2107  -783.37158   28734.853  -215.45347  498.9
7047   -246.70812  -400.37953
 12900  10.249218   290.97118   10836.614   22506.722  -8947.9032   76.
989669  -9024.8929  -8795.6749   1437.7714   29999.578   1072.4923  -11.98
6063   -701.99768   3.500578
 13000  10.592418   295.49005   8960.9975   22527.026  -8947.8723   78.
185342  -9026.0577  -8821.8783  -915.69665   28563.349  -764.65949  215.5
6997   -403.07129  -234.56612
 13100  10.935619   296.15618   9960.4716   22514.798  -8947.4296   78.
361597  -9025.7912  -8807.4588   538.15183   29476.362  -133.09954  318.0
2466   12.454951   324.19586
 13200  11.26322   298.61534   9053.9618   22524.989  -8947.2857   79.
012281  -9026.298   -8819.9961  -1180.0645   29034.773  -692.82292  -396.1
5206   1011.362    92.996281
 13300  11.60642   297.32828   8936.4197   22527.124  -8947.2377   78.
671729  -9025.9094  -8821.5887  -1517.5539   29070.907  -744.09368  -606.2
7458   872.19333   13.284026
 13400  11.949621   299.18254   9228.8156   22521.535  -8947.3399   79.
162359  -9026.5023  -8817.6119  -679.26883   29156.545  -790.82928  -17.07
8683   -137.68922   164.1893
```

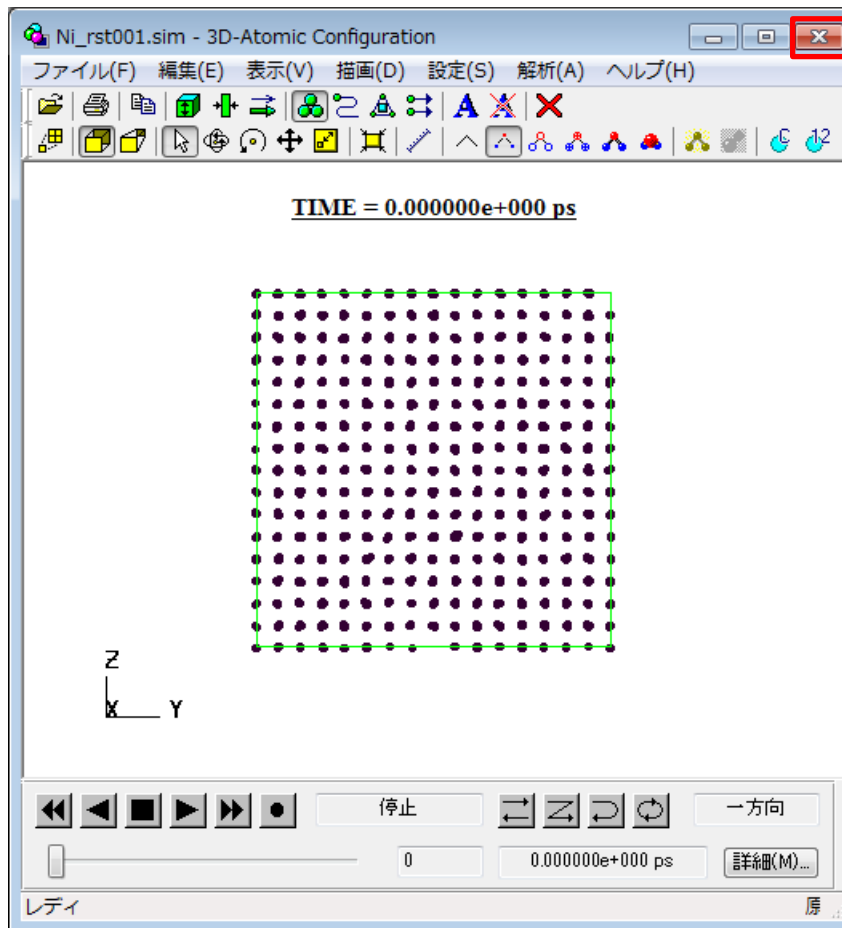
# リスタート計算結果1

「OK」をクリック



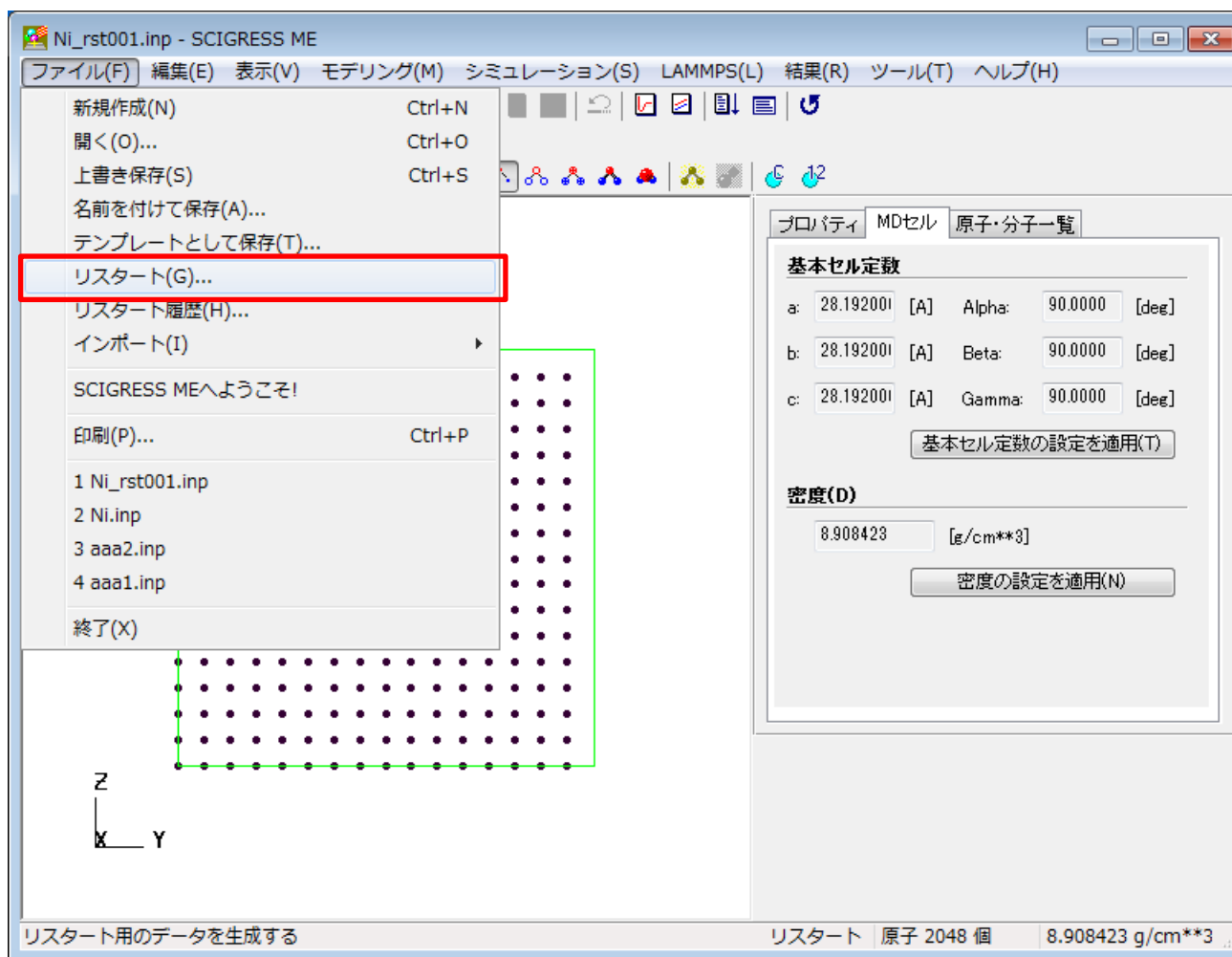
# リスタート計算結果1

 をクリックしてウインドウを閉じます



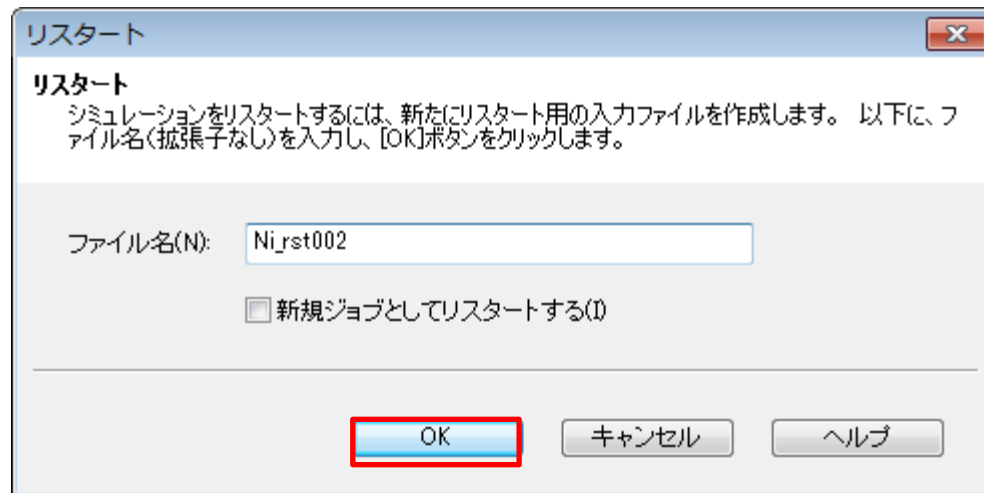
# リスタートデータの作成2

「ファイル」⇒「リスタート」を選択



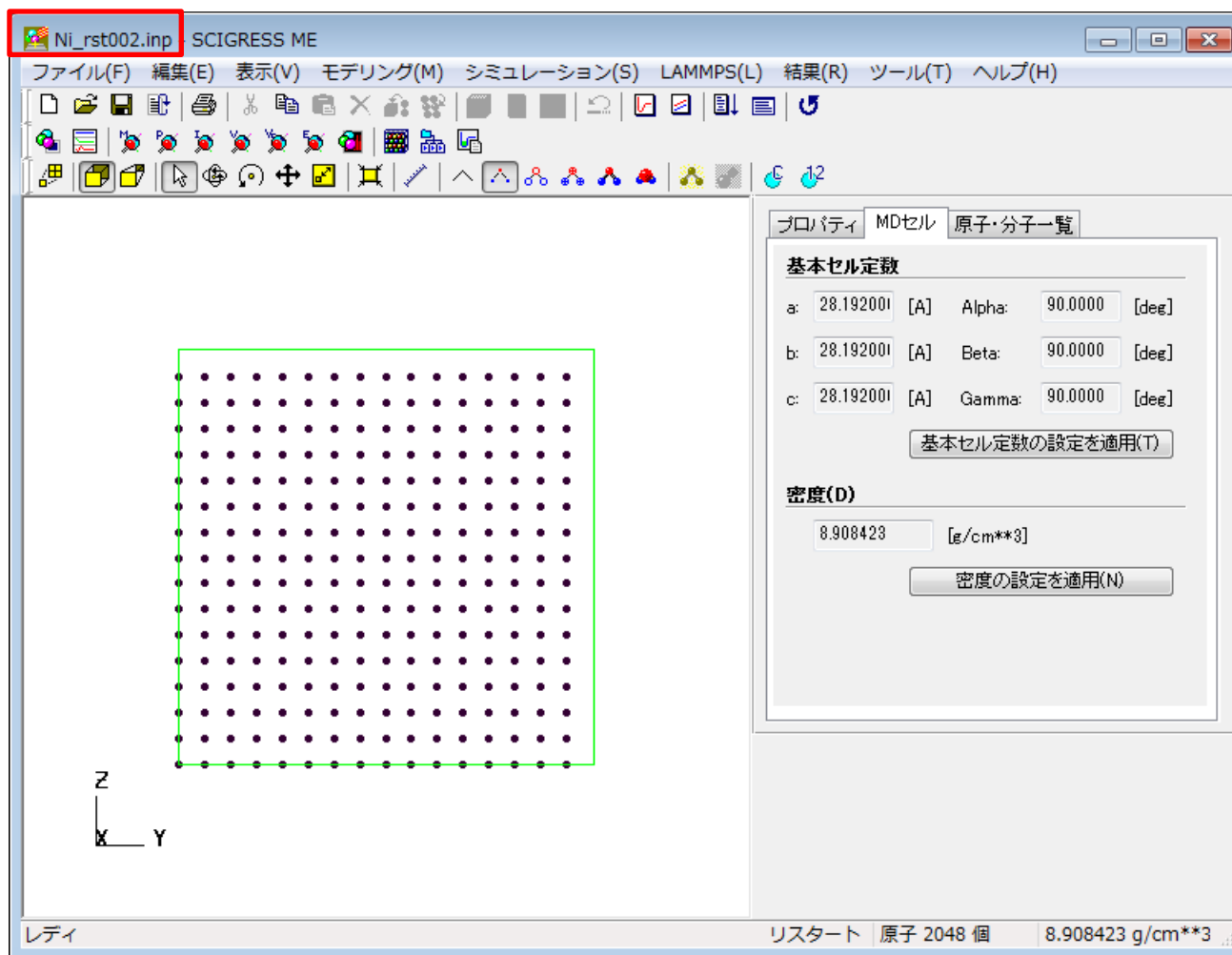
# リスタートデータの作成2

「OK」をクリック



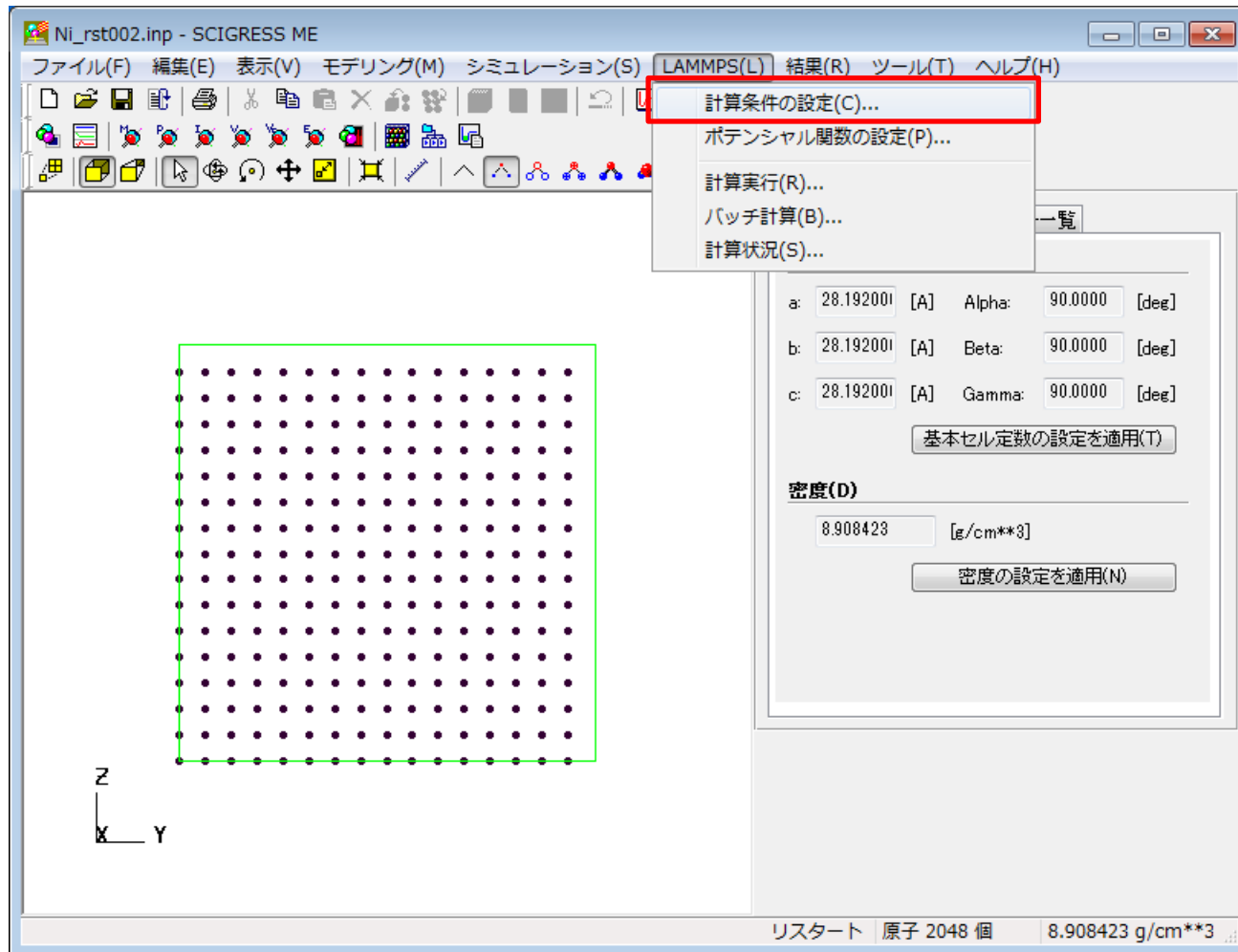
# リスタートデータの作成2

リスタートデータが生成されます



# リスタートデータの作成2

「LAMMPS」⇒「計算条件の設定」を選択



# リスタートデータの作成2

「設定」をクリック

計算条件

基本設定 外場 オプション

アンサンブル

- NEV
- NTV
- NPH
- NTP

シミュレーション時間(X)

総ステップ数: 10000 [steps]

時間刻み幅: 0.5 [fs]

出力間隔ステップ数: 100 [steps]

出力ステップ数: 100 [steps]

境界条件

	Lower	Upper
X:	p	p
Y:	p	p
Z:	p	p

温度

Start: 298 [K]

End: 298 [K]

Damp: 50 [fs]

圧力

- tri Start: 1 [atm]
- aniso End: 1 [atm]
- iso Damp: 500 [fs]
- stress

設定...

MDセル

- 一定 ステップ間隔: 1 [steps]
- 可変 remap: none

x: none 設定...

y: none 設定...

z: none 設定...

xy: none 設定...

xz: none 設定...

yz: none 設定...

OK キャンセル 適用(A) ヘルプ



# リスタートデータの作成2

Y欄でStart: **60000**、End: **60000**に設定し、「OK」をクリック

The image shows a 'Stress' dialog box with a grid of input fields for different axes. The Y-axis section is highlighted with a red box, showing 'Start: 60000 [atm]' and 'End: 60000 [atm]'. The 'OK' button is also highlighted with a red box.

Axis	Start [atm]	End [atm]	Damp [fs]
X	0	0	1000
Y	60000	60000	500
Z	0	0	1000
XY	0	0	1000
XZ	0	0	1000
YZ	0	0	1000

# リスタートデータの作成2

「OK」をクリック

計算条件

基本設定 外場 オプション

アンサンプル

- NEV
- NTV
- NPH
- NTP

シミュレーション時間(X)

総ステップ数: 10000 [steps]

時刻幅: 0.5 [fs]

出力間隔ステップ数: 100 [steps]

出力ステップ数: 100 [steps]

境界条件

	Lower	Upper
X:	p	p
Y:	p	p
Z:	p	p

温度

Start: 298 [K]

End: 298 [K]

Damp: 50 [fs]

MDセル

- 一定 ステップ間隔: 1 [steps]
- 可変 remap: none

x: none 設定...

y: none 設定...

z: none 設定...

xy: none 設定...

xz: none 設定...

yz: none 設定...

圧力

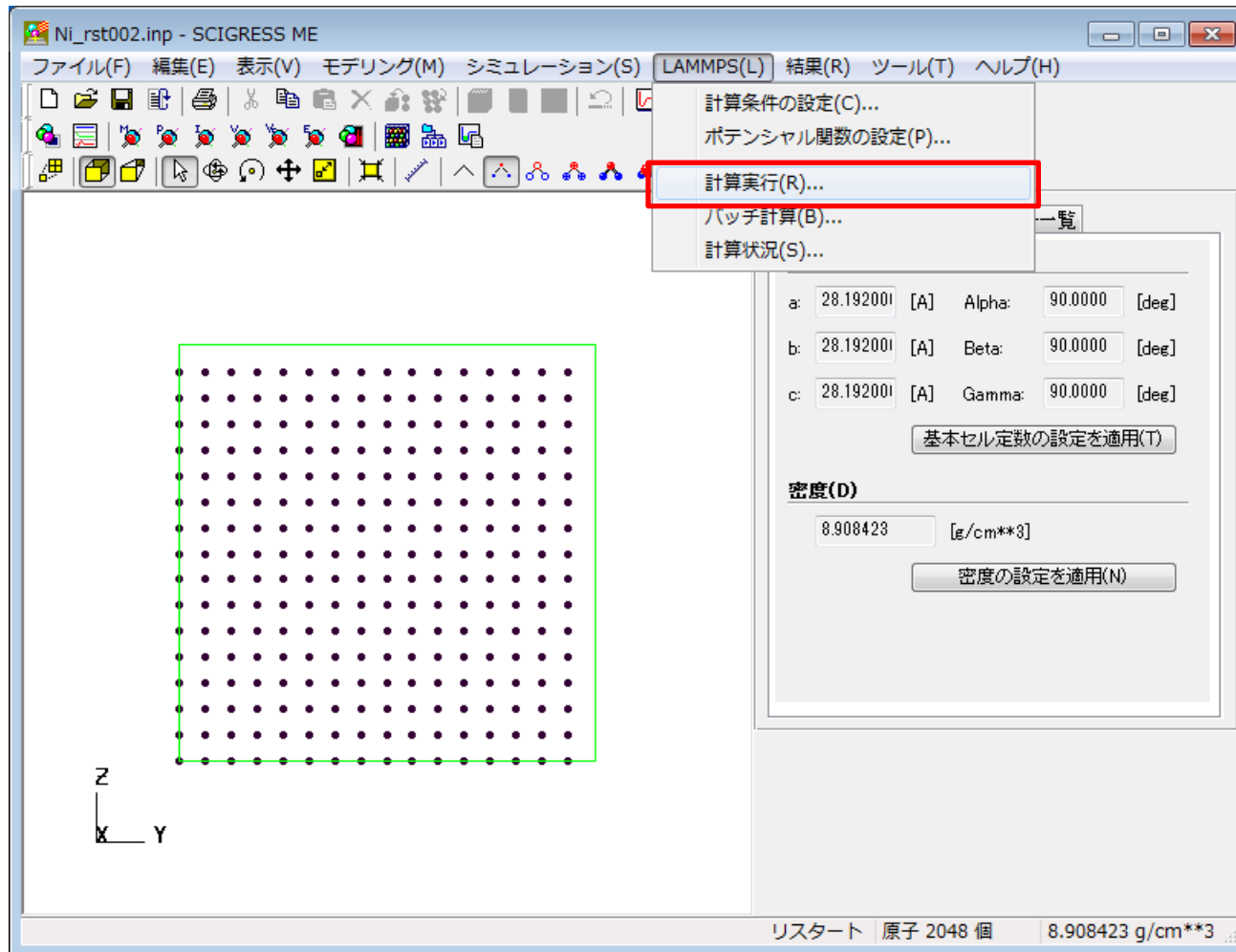
- tri Start: 1 [atm]
- aniso End: 1 [atm]
- iso Damp: 500 [fs]
- stress

設定...

OK キャンセル 適用(A) ヘルプ

# リスタート計算の実行2

「LAMMPS」⇒「計算実行」を選択



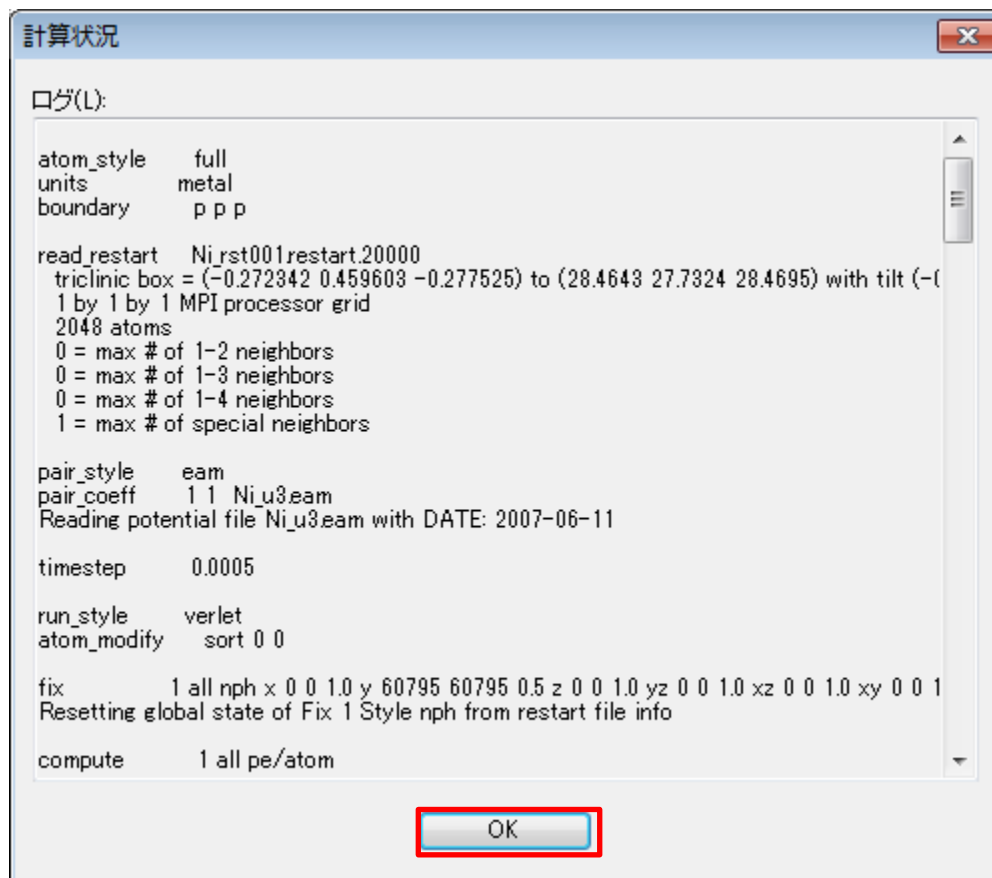
# リスタート計算の実行2

LAMMPSでリスタート計算が実行されます

```
C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20160216\bin\lmp_serial.exe
 22200   8.2836151   383.13354   21578.792   22561.207   -8847.2644   101
.37542  -8948.6398   -8543.4005   15451.971   32306.5     16977.904   -657.6
5606   -951.94784    696.70362
 22300   8.642416     381.18164   21147.743   22600.632   -8845.1048   100
.85895  -8945.9637    -8546.7904   16529.692   28701.68    18211.855   1171.
9499   -98.938659    3098.3822
 22400   9.0012159    378.3716    20992.105   22626.012   -8842.7414   100
.11543  -8942.8568    -8546.2899   12463.733   35637.747   14874.835   93.82
0634   -50.513243    2251.567
 22500   9.3600171    381.20236   11619.582   22759.266   -8840.6281   100
.86444  -8941.4925    -8675.5694   -3804.0265   40858.35    -2195.5768   -1951.
0753   -1669.035     3124.6338
 22600   9.703217     395.58143   4775.5035   22845.251   -8840.0826   104
.66907  -8944.7517    -8771.9892   -10264.465   39595.583   -15004.608   -853.0
3686   -841.08738    945.79241
 22700   10.046418    392.10408   7210.542    22812.355   -8840.3869   103
.74898  -8944.1359    -8737.7206   -4505.9009   42052.662   -15915.135   618.9
3388   222.43887     141.49876
 22800   10.389619    379.87158   7521.7001   22810.374   -8841.9412   100
.51232  -8942.4535    -8734.8539   -3206.8137   38905.022   -13133.108   263.2
5698   -27.18571     683.16511
 22900   10.748419    417.2485    9357.858    22765.427   -8841.19     110
.40208  -8951.5921    -8708.2236   -773.5316    37313.486   -8466.3799   662.
3203   110.36347     319.69226
```

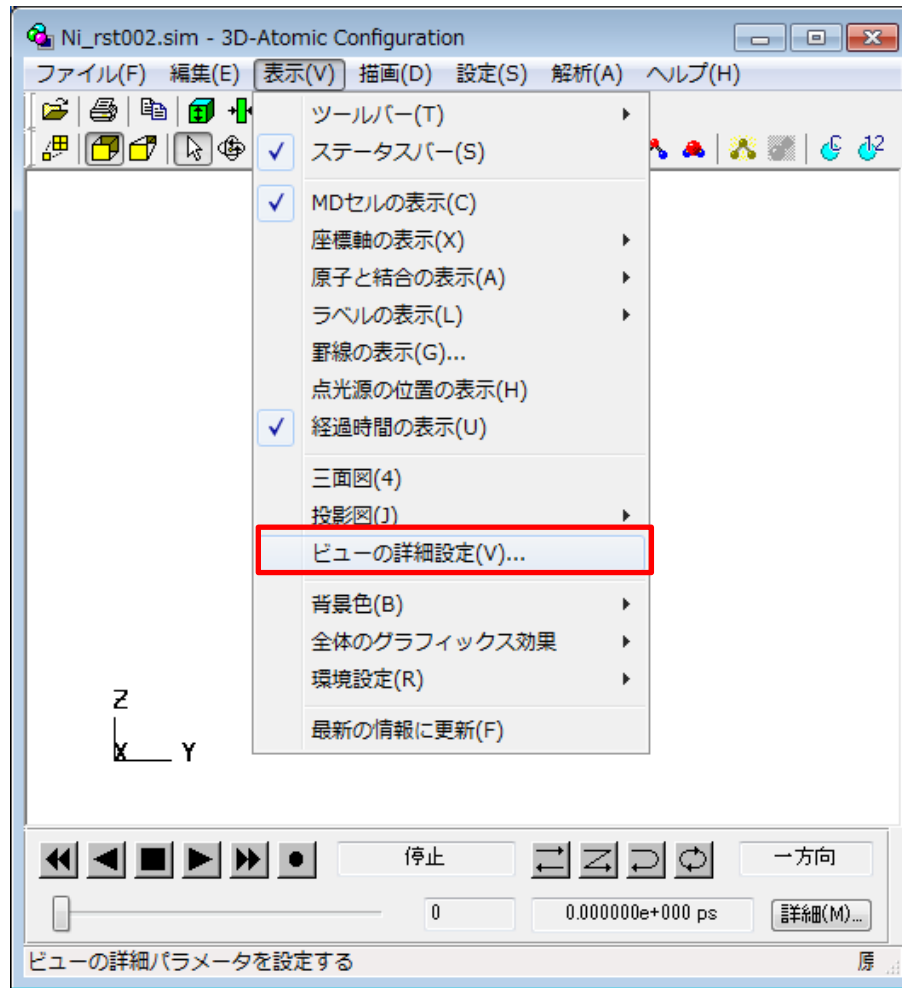
# リスタート計算結果2

「OK」をクリック



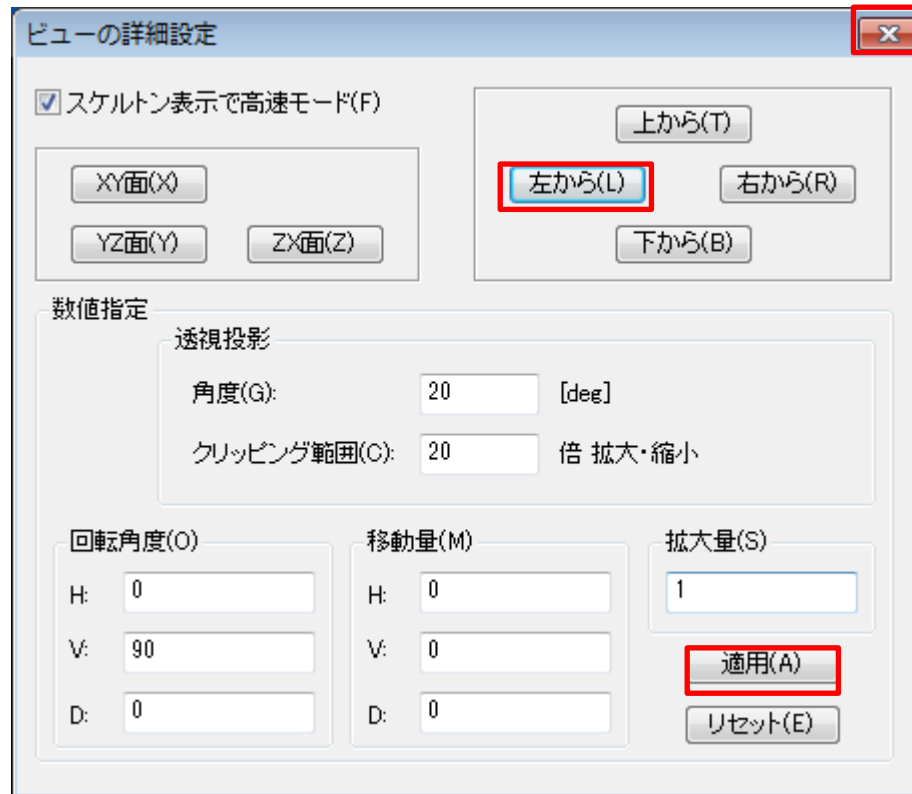
# リスタート計算結果2

「表示」⇒「ビューの詳細設定」を選択



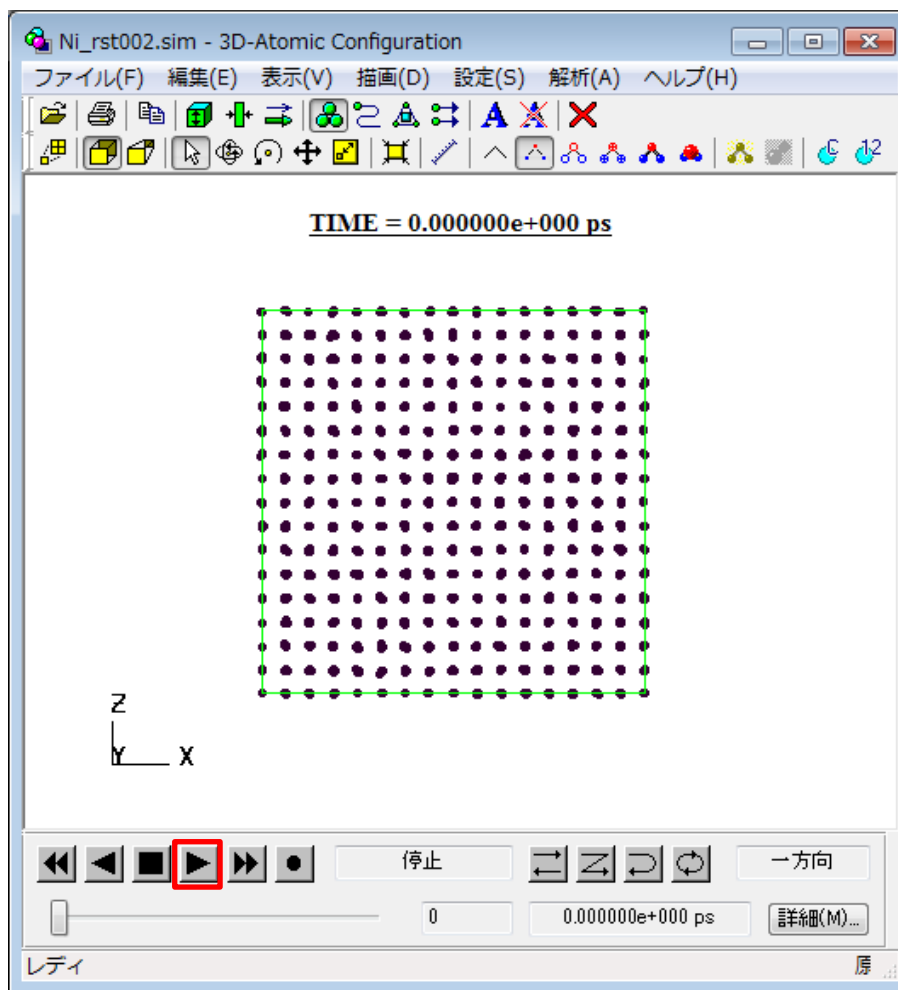
# リスタート計算結果2

「左から」、「適用」をクリックし、 をクリックしてウインドウを閉じます



# リスタート計算結果2

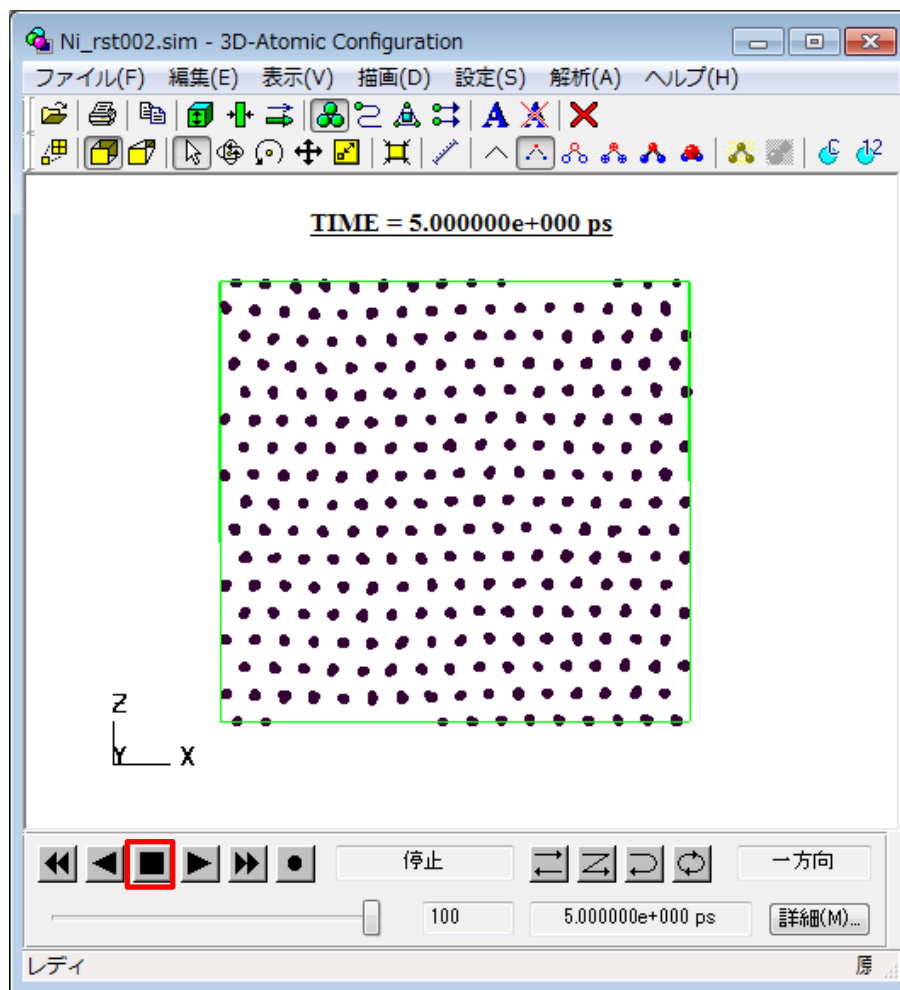
▶ をクリックし、アニメーションを実行します





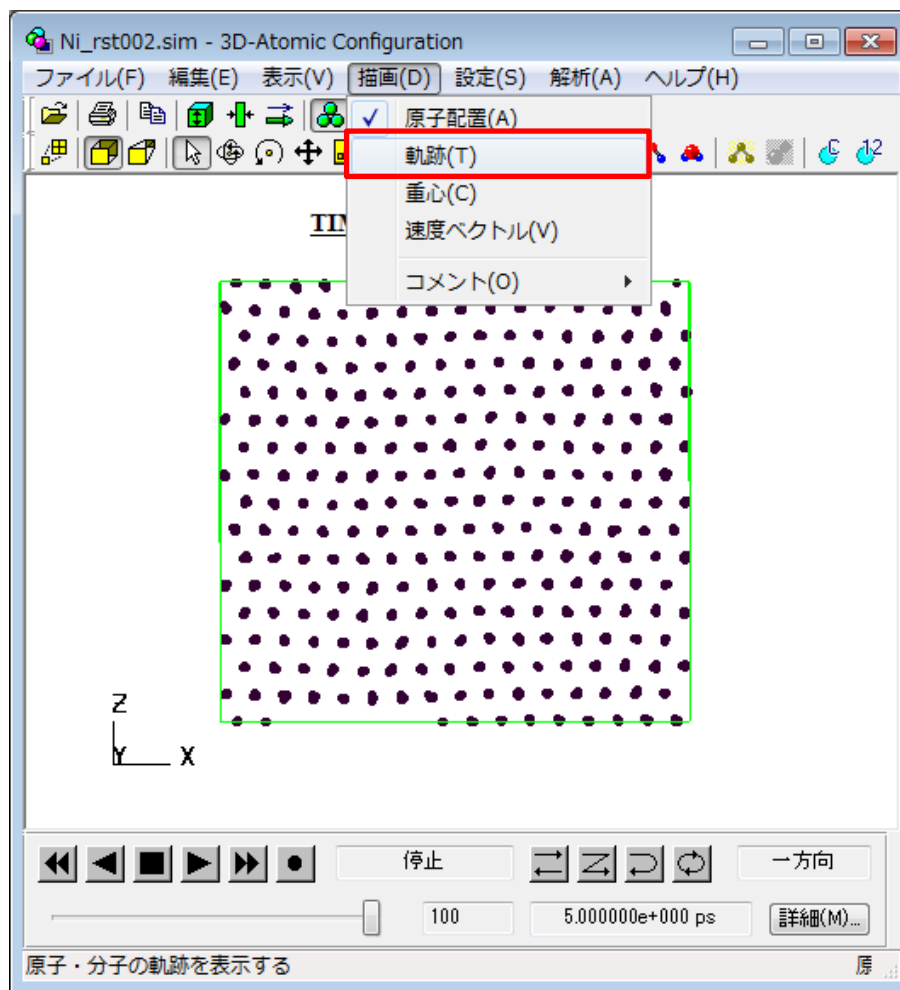
# リスタート計算結果2

- をクリックし、アニメーションを停止します



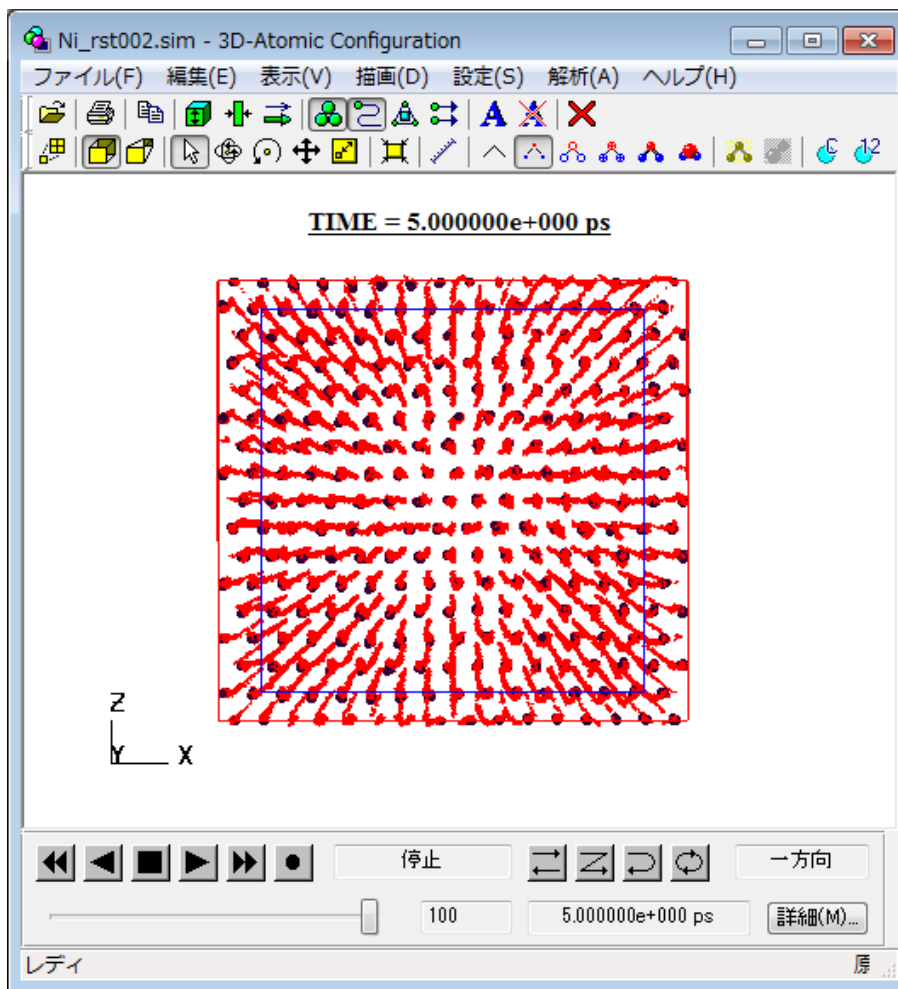
# リスタート計算結果2

「描画」⇒「軌跡」を選択




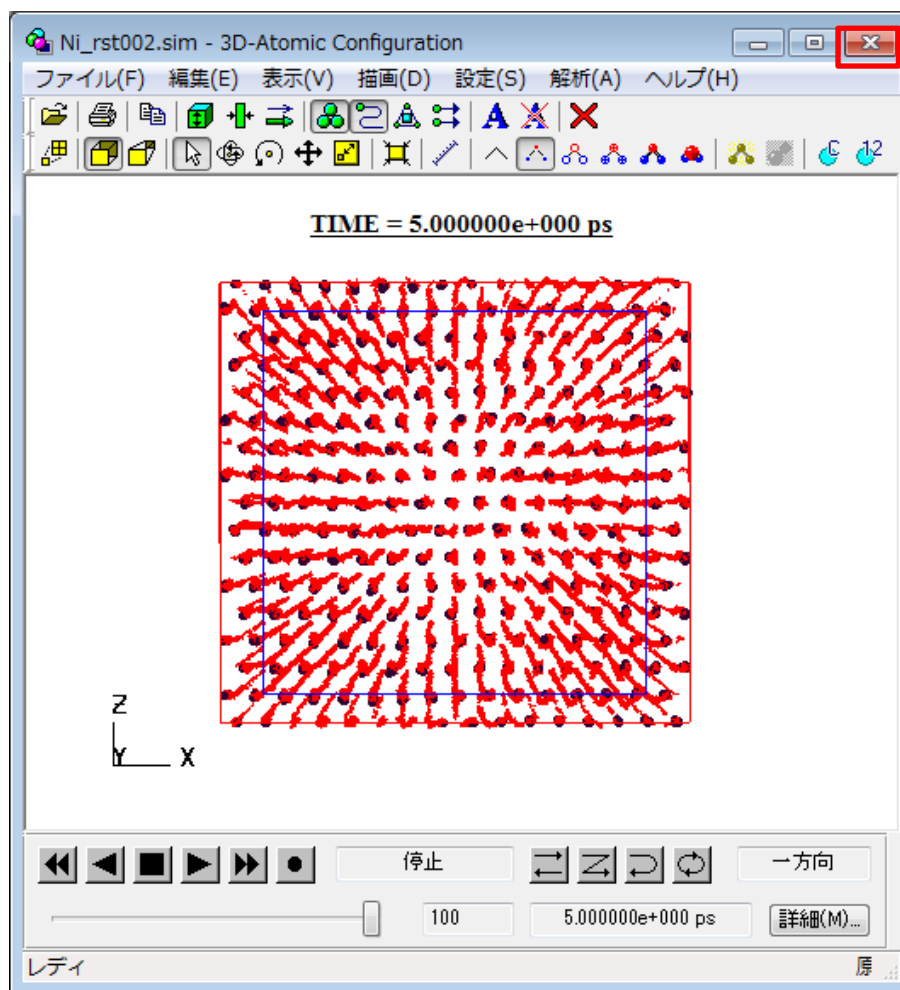
# リスタート計算結果2

原子の軌跡が表示されます



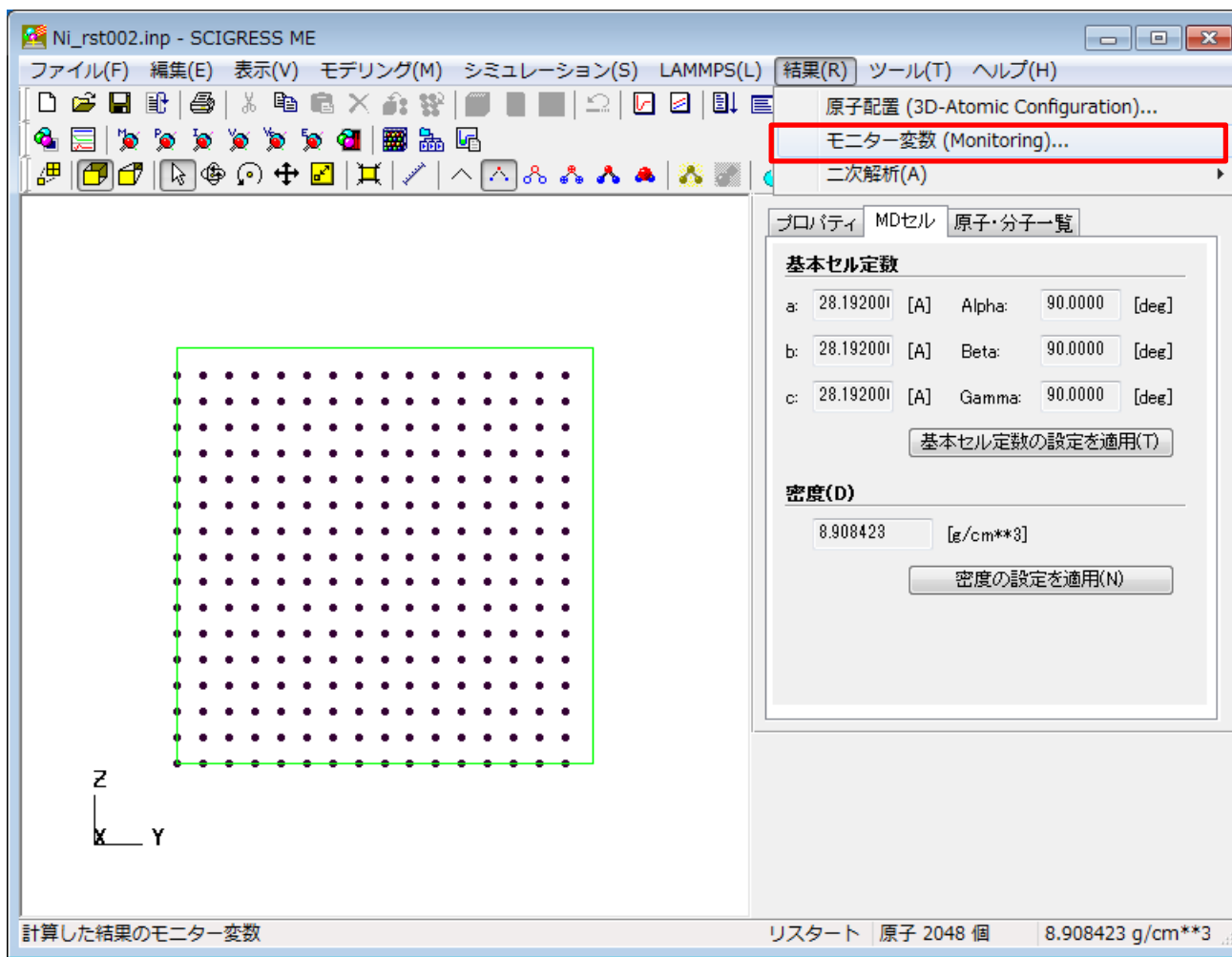
# リスタート計算結果2

 をクリックしてウィンドウを閉じます



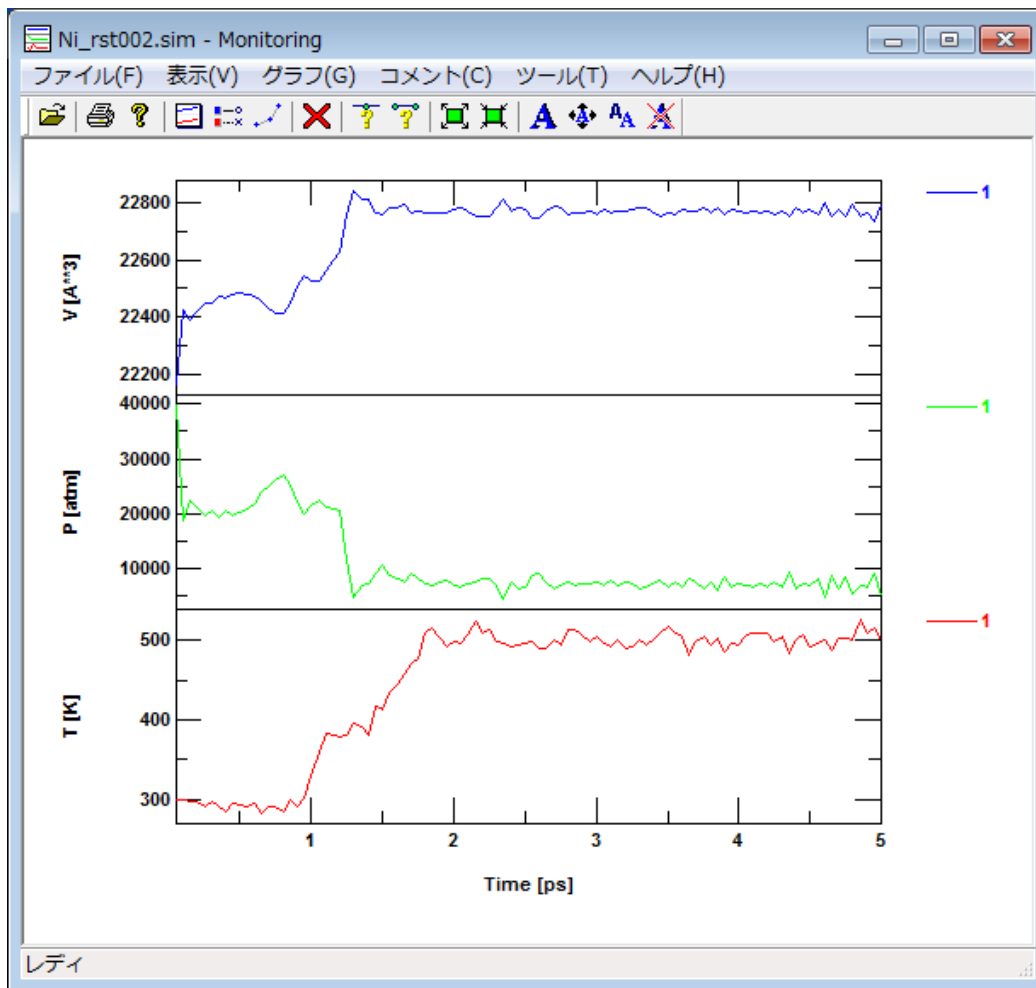
# リスタート計算結果2

「結果」⇒「モニター変数」を選択



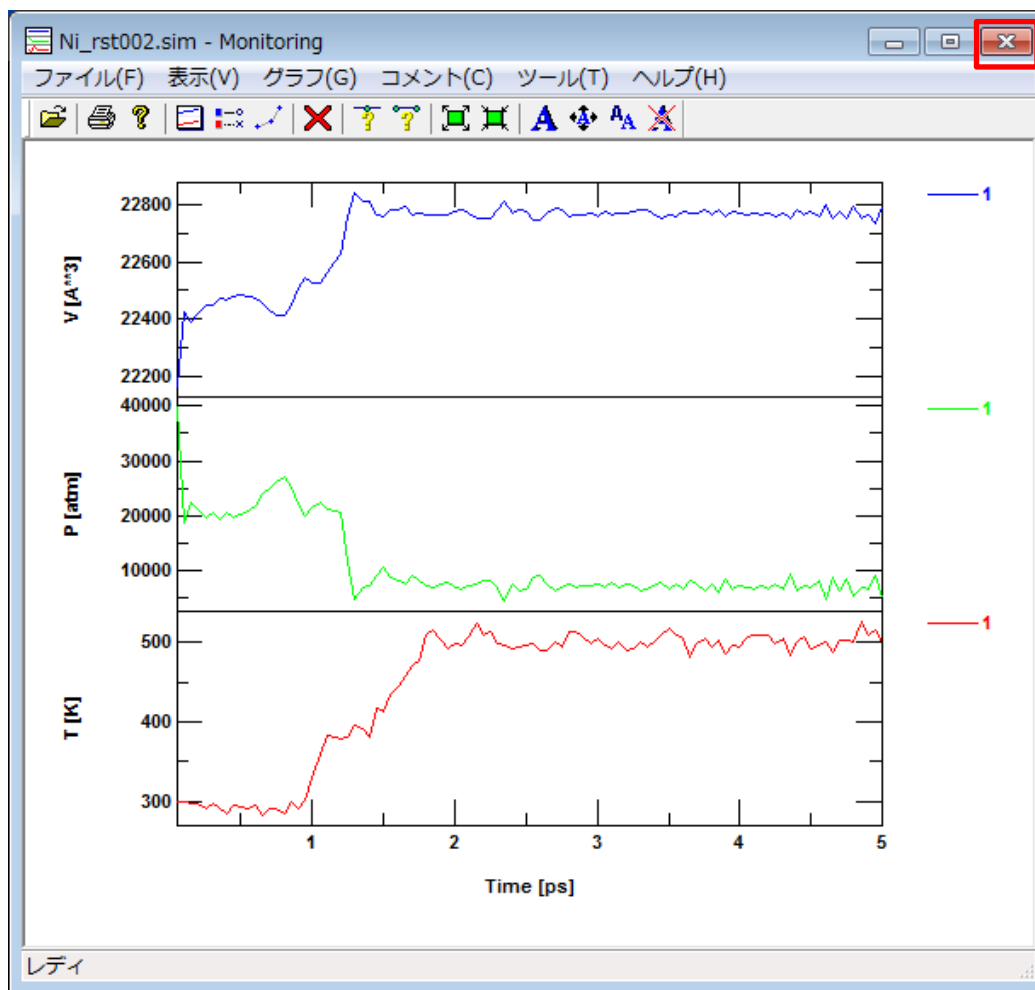
# リスタート計算結果2

温度、圧力、体積の時間変化のグラフが表示されます



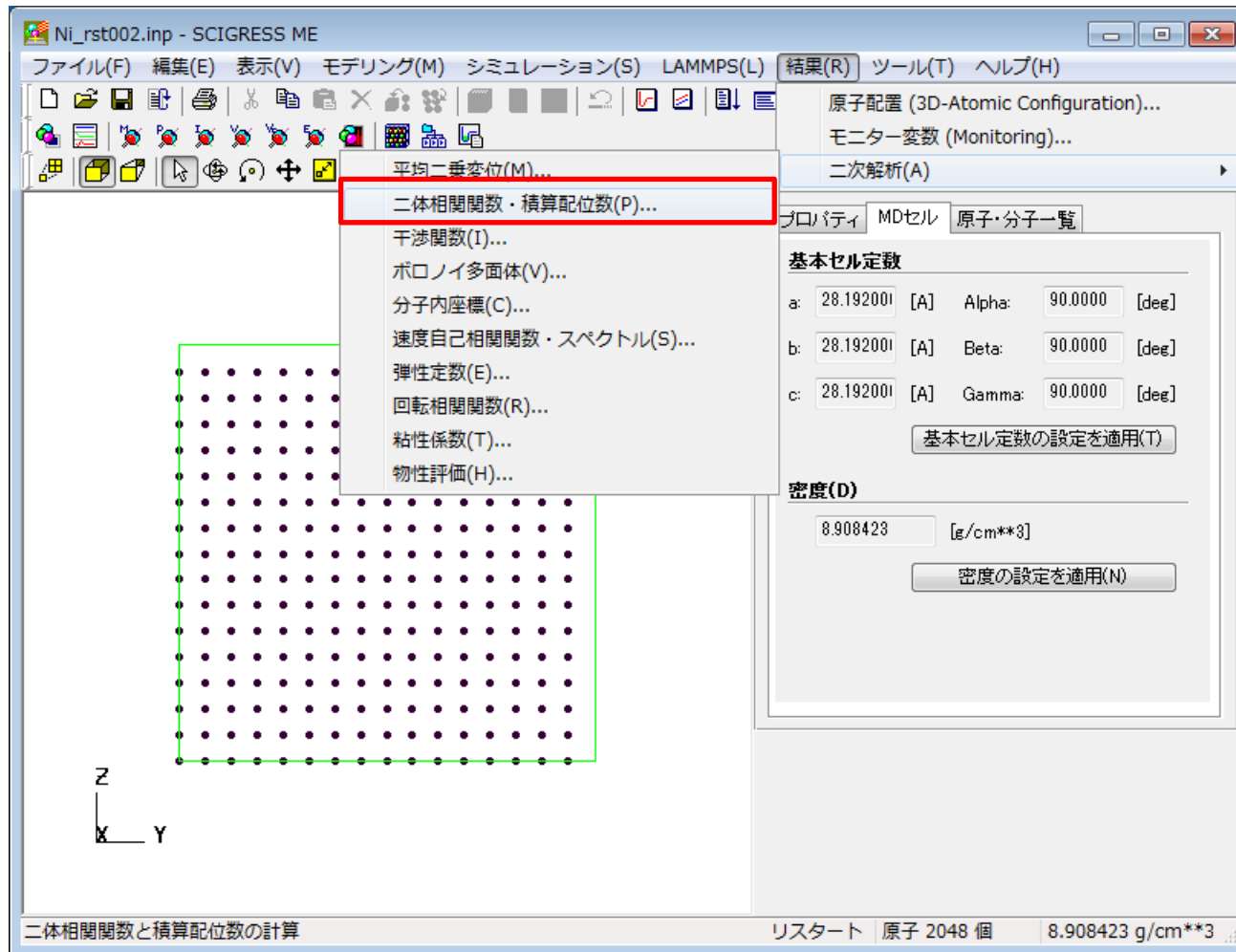
# リスタート計算結果2

 をクリックしてウィンドウを閉じます



# 二次解析(二体相関関数)

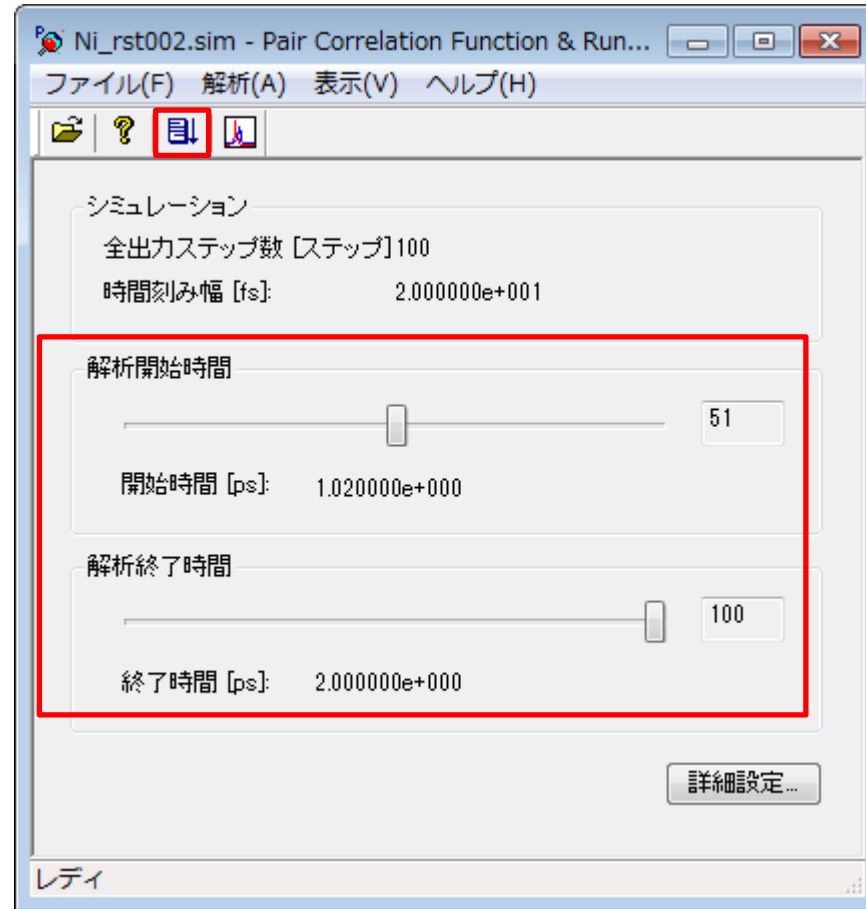
「結果」⇒「二次解析」⇒「二体相関関数・積算配位数」を選択



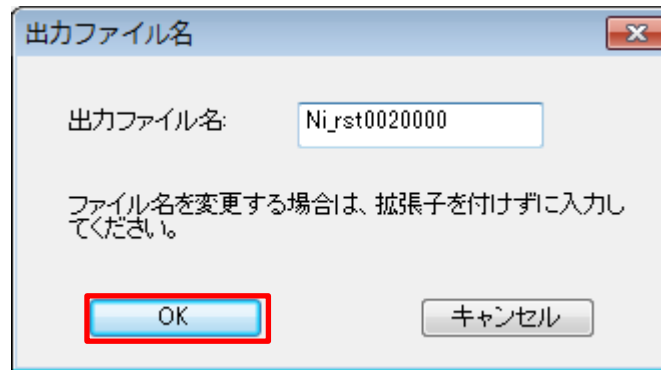


# 二次解析(二体相関関数)

解析開始時間:**51**、解析終了時間:**100** を設定し、 をクリック



「OK」をクリック



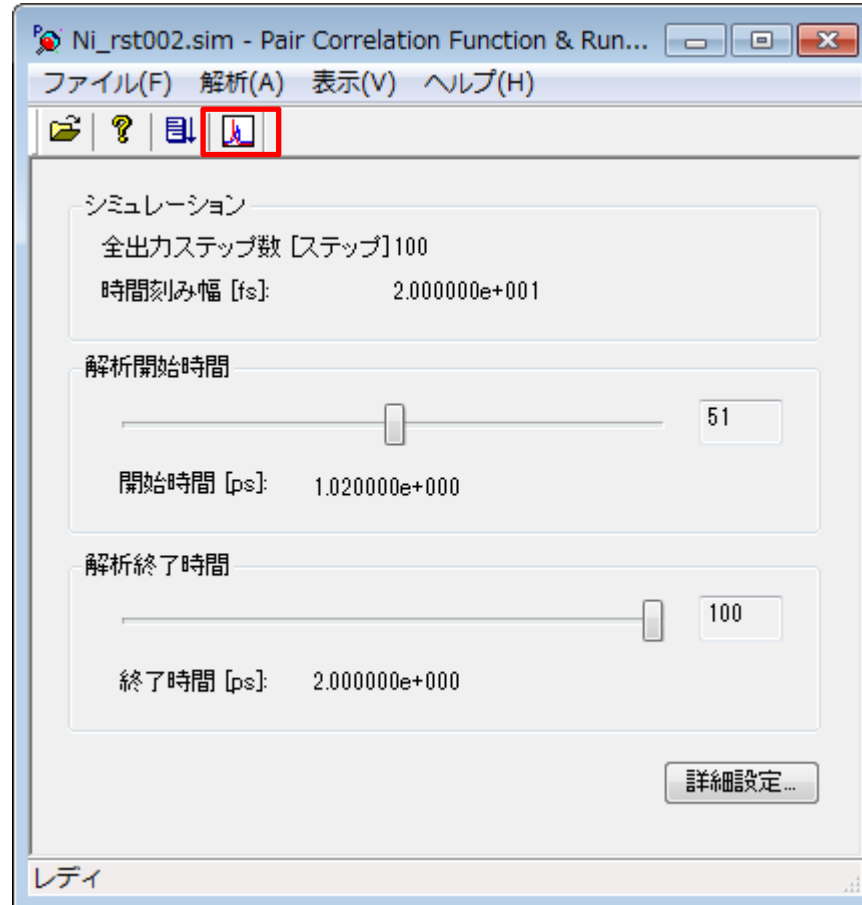
# 二次解析(二体相関関数)

プログレスバーが100%になったら、「閉じる」をクリック



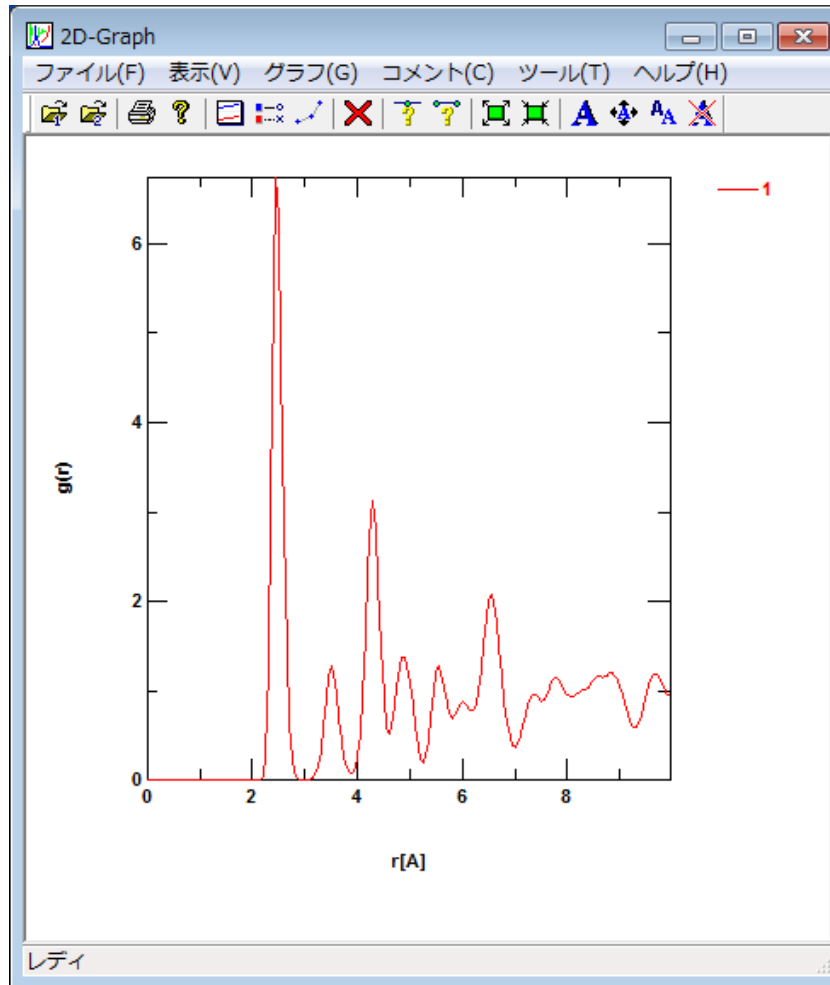
# 二次解析(二体相関関数)

 をクリック



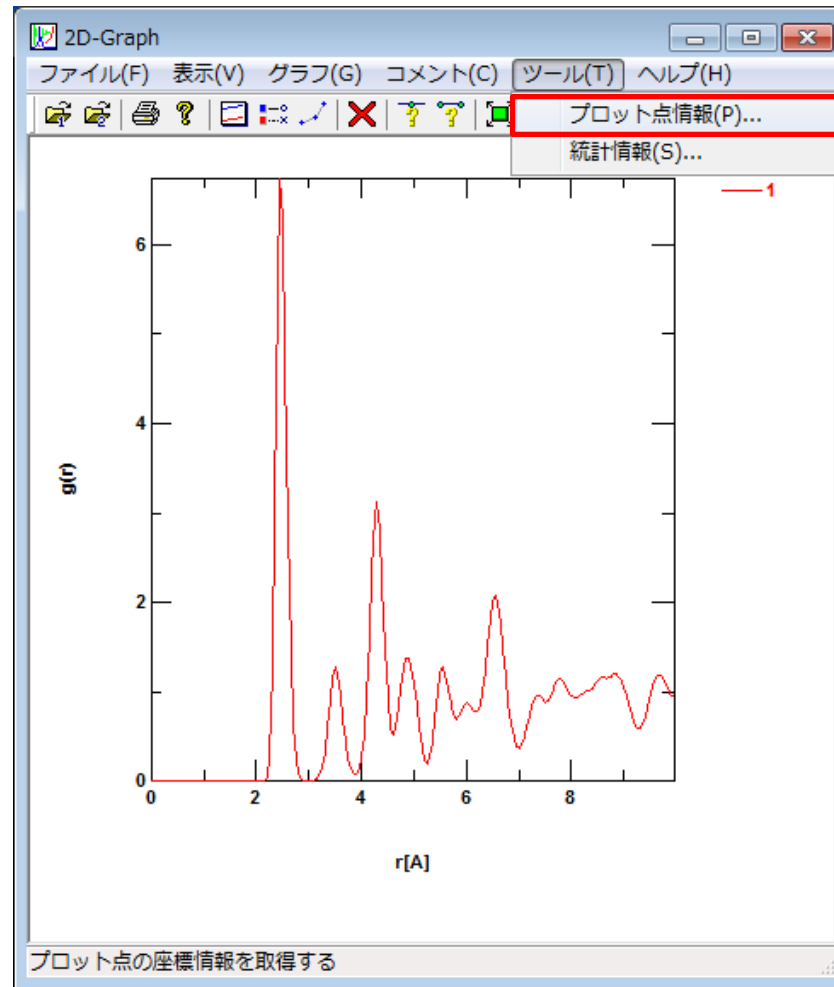
# 二次解析(二体相関関数)

二体相関関数のグラフが表示されます



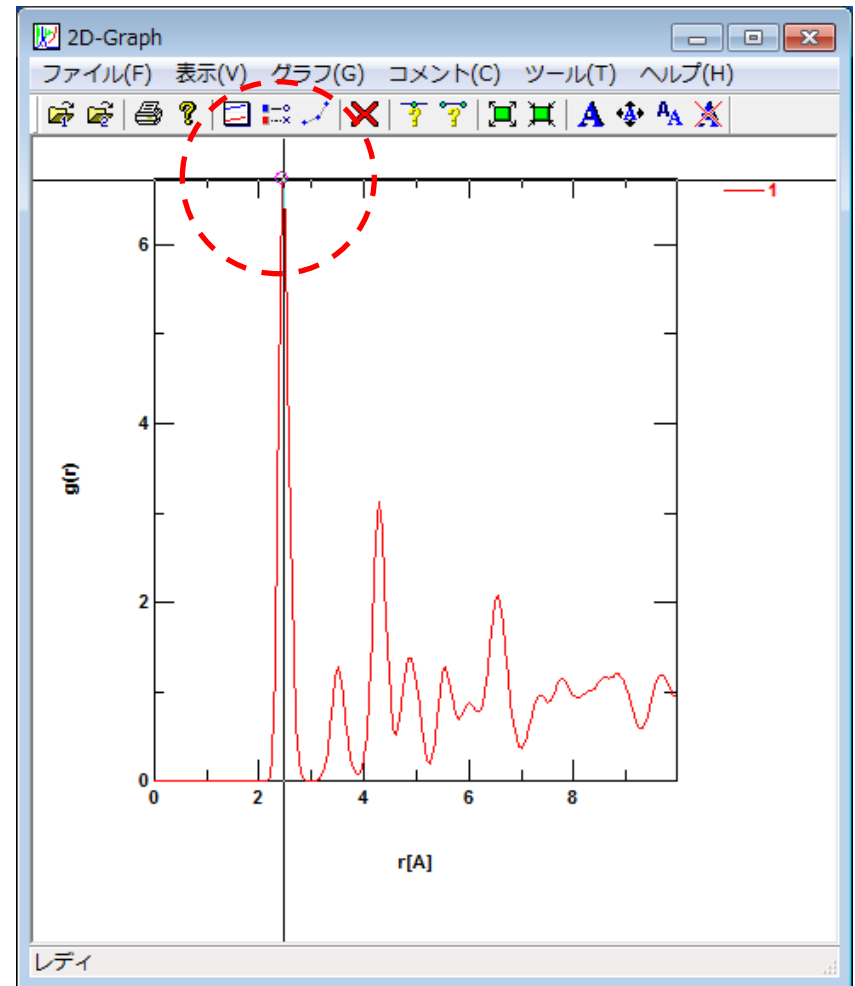
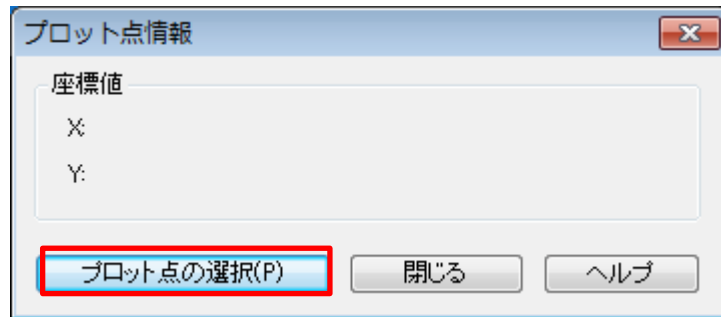
# 二次解析(二体相関関数)

「ツール」→「プロット点情報」を選択



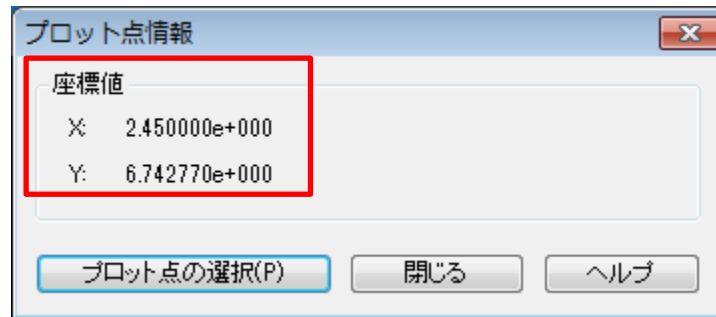
# 二次解析(二体相関関数)

「プロット点の選択」をクリックし、十字の中心を第1ピークの位置に合わせクリック



※十字線を消すには、グラフ内で右クリック


第1ピークの座標値が表示されます。

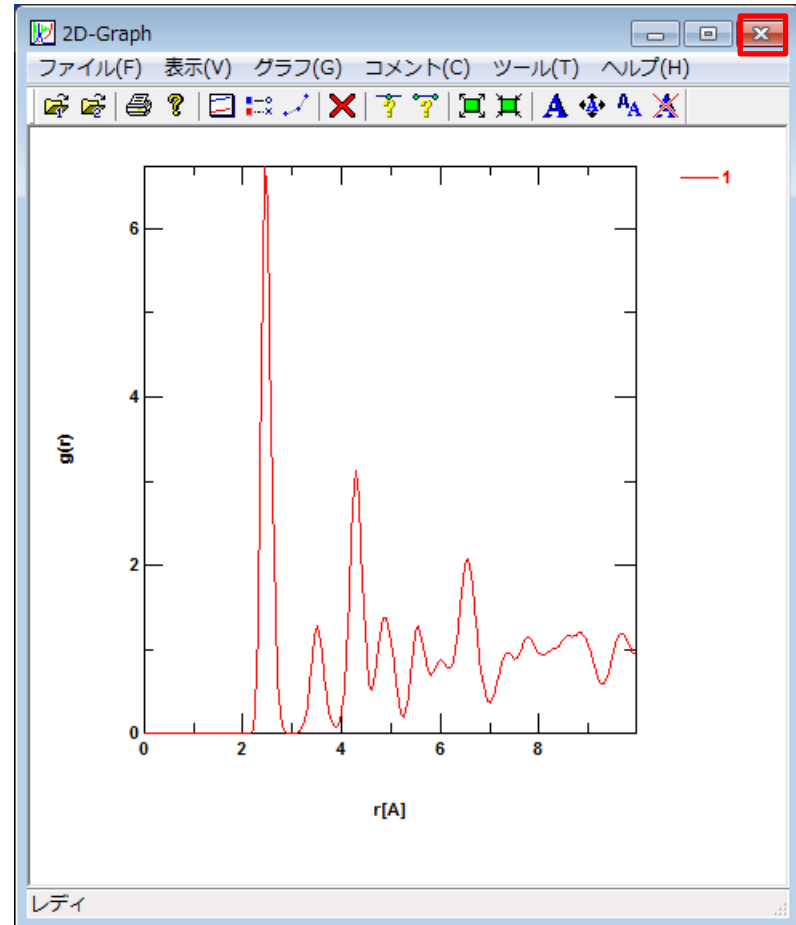
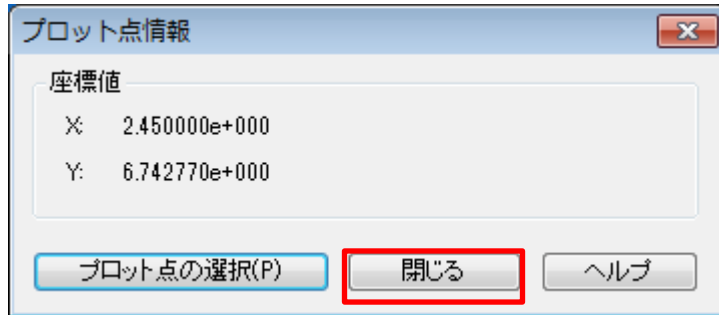




# 二次解析(二体相関関数)

「閉じる」をクリック。

 をクリックしてウィンドウを閉じます。



```
# Created by SCIGRESS ME

variable FileName string Ni

log      ${FileName}.log

atom_style    full
units        metal
boundary      p p p

read_data     Ni.ldt

pair_style    eam
pair_coeff    1 1 Ni_u3.eam

timestep     0.0005
velocity     all create 298 4928459

run_style     verlet
atom_modify   sort 0 0

fix          1 all npt temp 298 298 0.1 tri 1.01325 1.01325 0.5

compute      1 all pe/atom

thermo_style  custom step cpu temp press vol etotal ke pe enthalpy pxx pyy pzz pxy pyz pxz
thermo       100
dump         1 all custom 100 ${FileName}.dmp id mol type q xsu ysu zsu vx vy vz c_1
dump_modify  1 sort id

restart      10000 ${FileName}.restart

run          10000
```

Created by SCIGRESS ME

2048 atoms

1 atom types

0.00000000 28.19200000 xlo xhi  
0.00000000 28.19200000 ylo yhi  
0.00000000 28.19200000 zlo zhi  
0.00000000 0.00000000 0.00000000 xy xz yz

#  
# SCIGRESS Molecule Types  
#  
# 1 Ni  
#  
# SCIGRESS Atom Types  
#  
# 1 Ni  
#  
# SCIGRESS Bond Types  
#  
#

Masses

1 58.69340000

Atoms

1 1 1 +0.000000 +0.00000000 +0.00000000 +0.00000000  
2 1 1 +0.000000 +1.76200000 +1.76200000 +0.00000000  
3 1 1 +0.000000 +1.76200000 +0.00000000 +1.76200000  
4 1 1 +0.000000 +0.00000000 +1.76200000 +1.76200000  
...

## ◆ サポートの範囲:

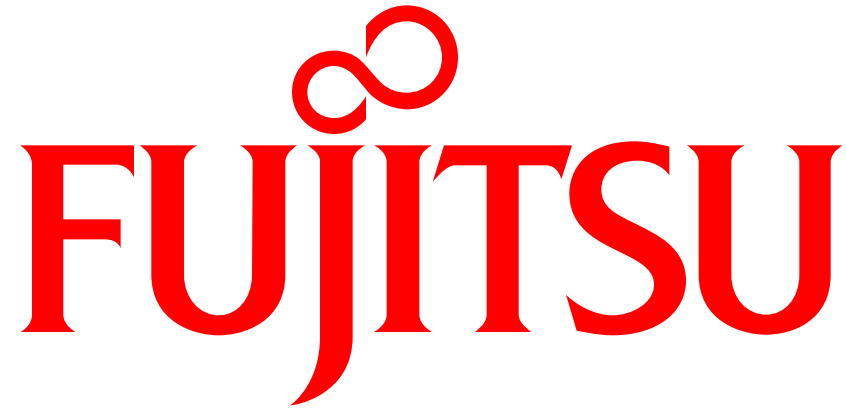
- SCIGRESS ME のLAMMPS連携機能の使用方法に関するお問合せ  
※サポート製品をご購入いただく必要がございます。

## ◆ サポートの範囲外:

LAMMPSは弊社製品ではないため、  
以下のお問合せはサポート製品の対象外となります。

- LAMMPSの入手方法、インストール方法
- LAMMPSの計算方法や理論(手法、ポテンシャル、等)
- LAMMPSによる計算のノウハウ、事例、精度比較、等
- コマンドラインでのLAMMPSの実行方法等

※受託計算や計算方法の調査等はサポートとは別費用(個別見積)となります。



**shaping tomorrow with you**