

Winmostar チュートリアル
LAMMPS
固体壁面を含む系
V8.000

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/01

概要・注意点

- 本チュートリアルでは、固体壁と流体(気体または液体)を含む系の例として、2枚のグラフェンに挟まれた領域における水の挙動を観察する手順を示します。
- 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。
- ここでは固体壁の座標を完全に固定するため、固体壁付近の系内の温度が局所的に低くなる点に注意してください。

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_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。

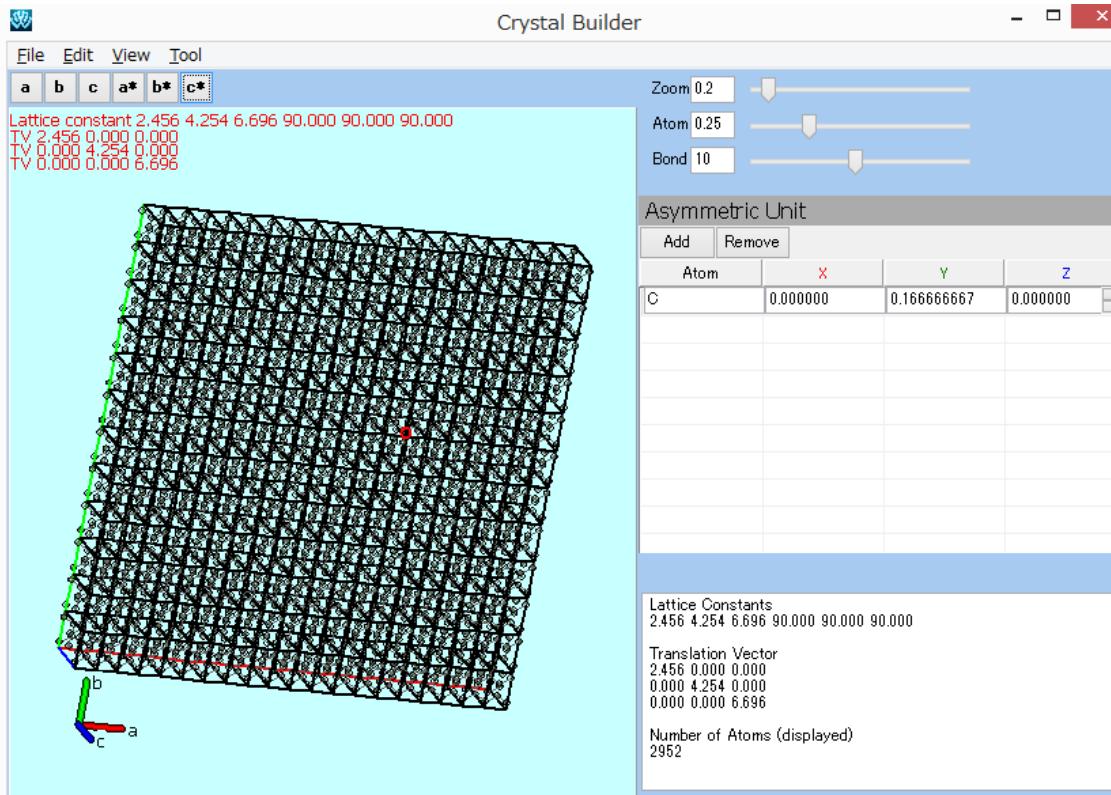
LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository

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** the source code and dependencies in the LAMMPS repository, including the LAMMPS core, USER-MOLECULE, USER-COMM, and 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-QM (only useful when linking to a QM software). USER-QM2P (requires external library). SCAM is provided by the USER-SCAM package which is included. The serial executable additionally does not contain the LAMMPS and SCAM (do not have their own executables). These binary files are generated with mingw32-make and built in a



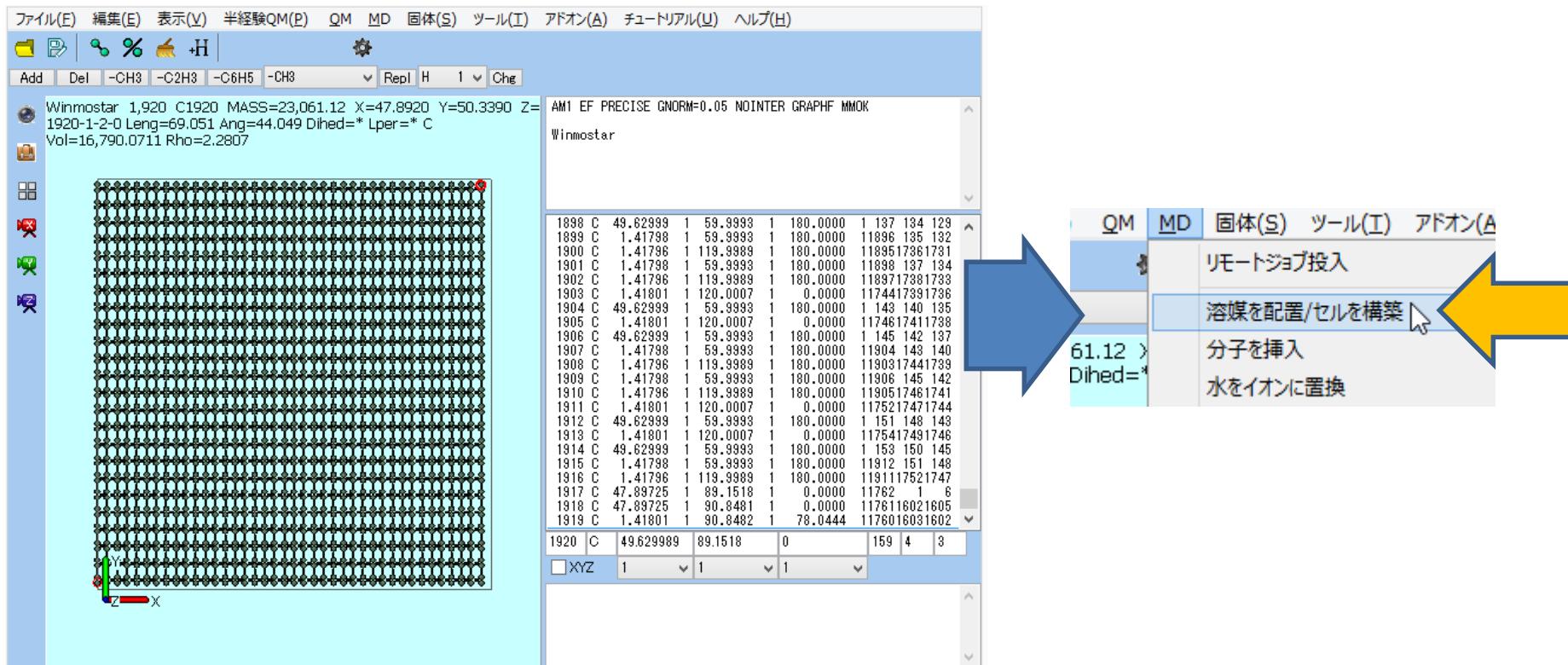
I. 系の作成

[固体]-[結晶ビルダ]を起動し、Orthorhombic 69 Fmmm、 $a=2.456 \text{ \AA}$ 、 $b=4.254 \text{ \AA}$ 、 $c=6.696 \text{ \AA}$ 、 $(0.0, 0.166666667, 0.0)$ にC原子が置かれた結晶を作成する。
次に、[Edit]-[Repeat]にて $20 \times 12 \times 1$ にスーパーセル展開する。
最後に[File]-[Save As]から「graphene.cif」として保存し、[File]-[Exit]をクリックする。



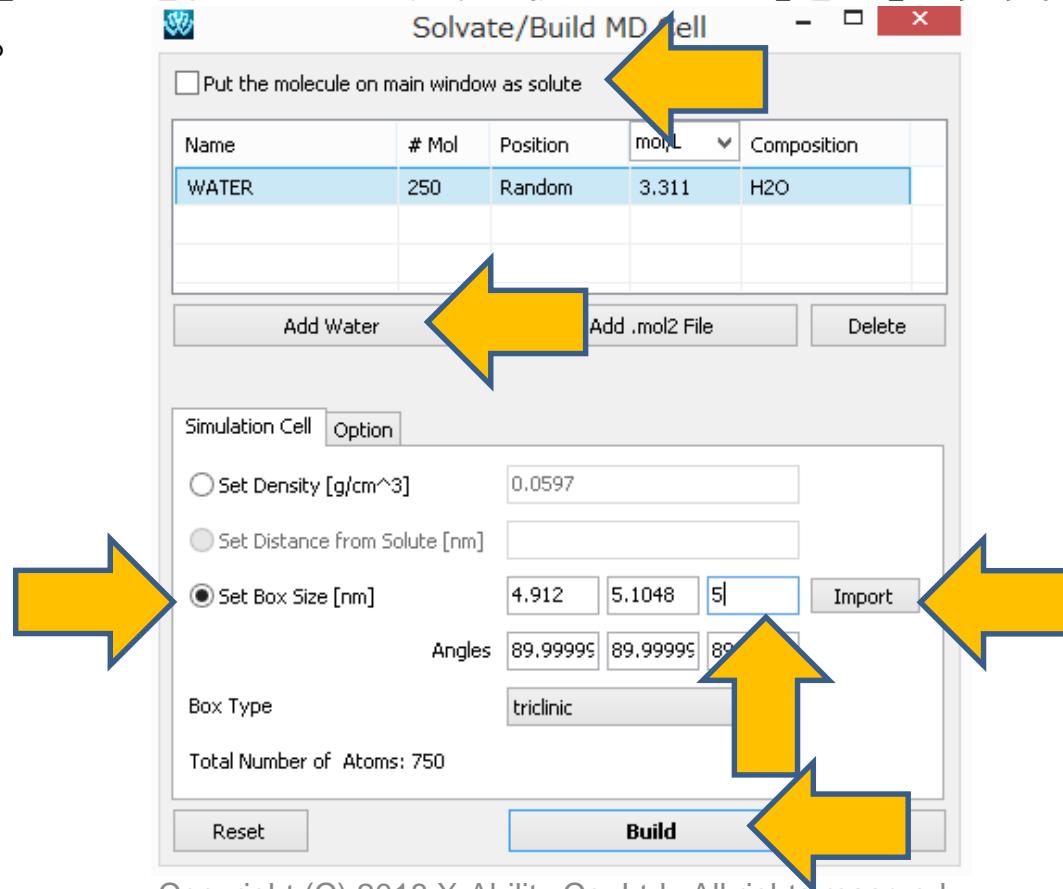
I. 系の作成

メイン画面の[ファイル]-[開く]から先ほどの「graphene.cif」を開く。
[溶媒を配置/セルを構築]を選択する。



I. 系の作成

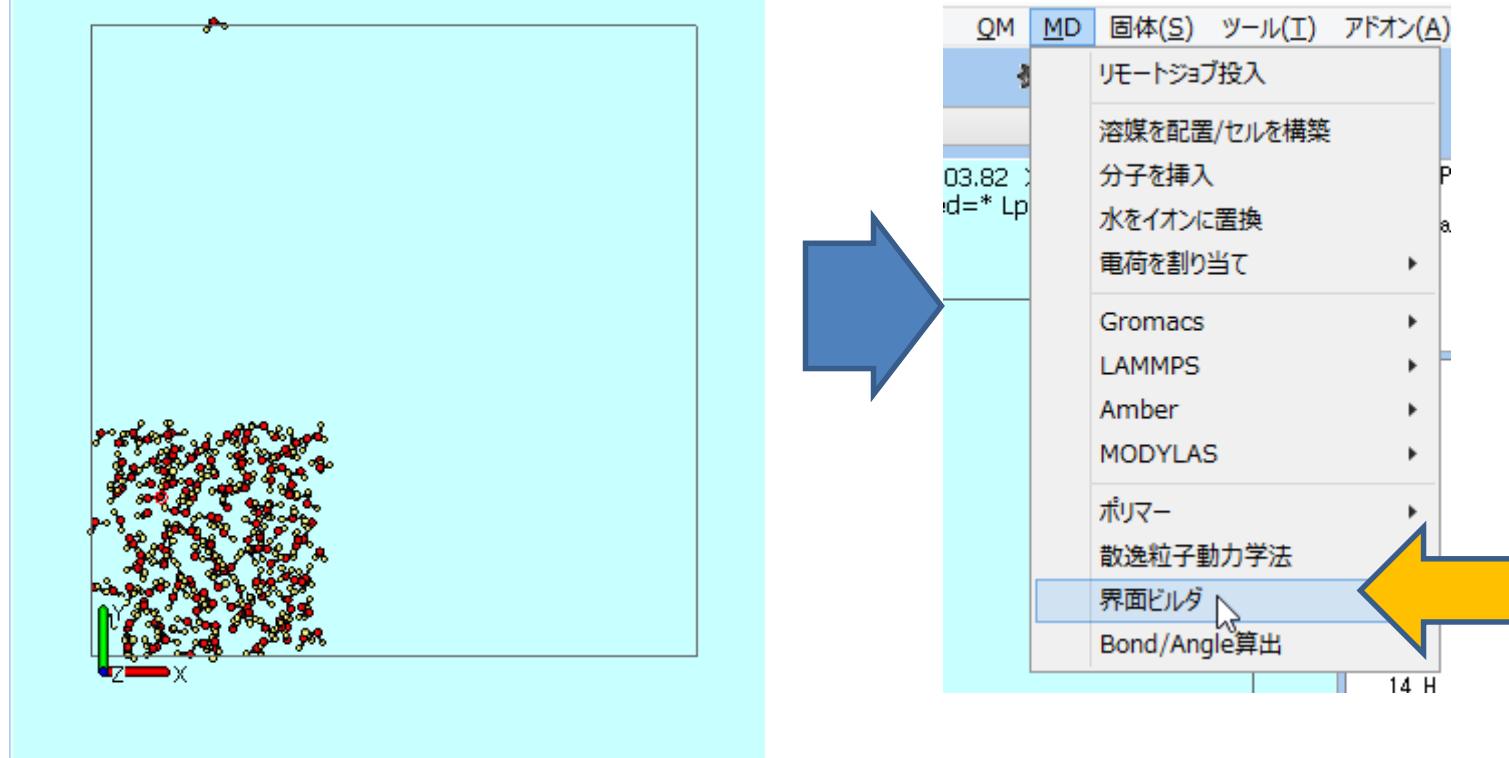
「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add Water」ボタンを押して「250」と入力して「OK」を押す。次に「Set Box Size」にチェックを入れ、先に「Import」ボタンを押してから、その横の「0.6696」を「5」に変更して「Build」ボタンをクリックする。



I. 系の作成

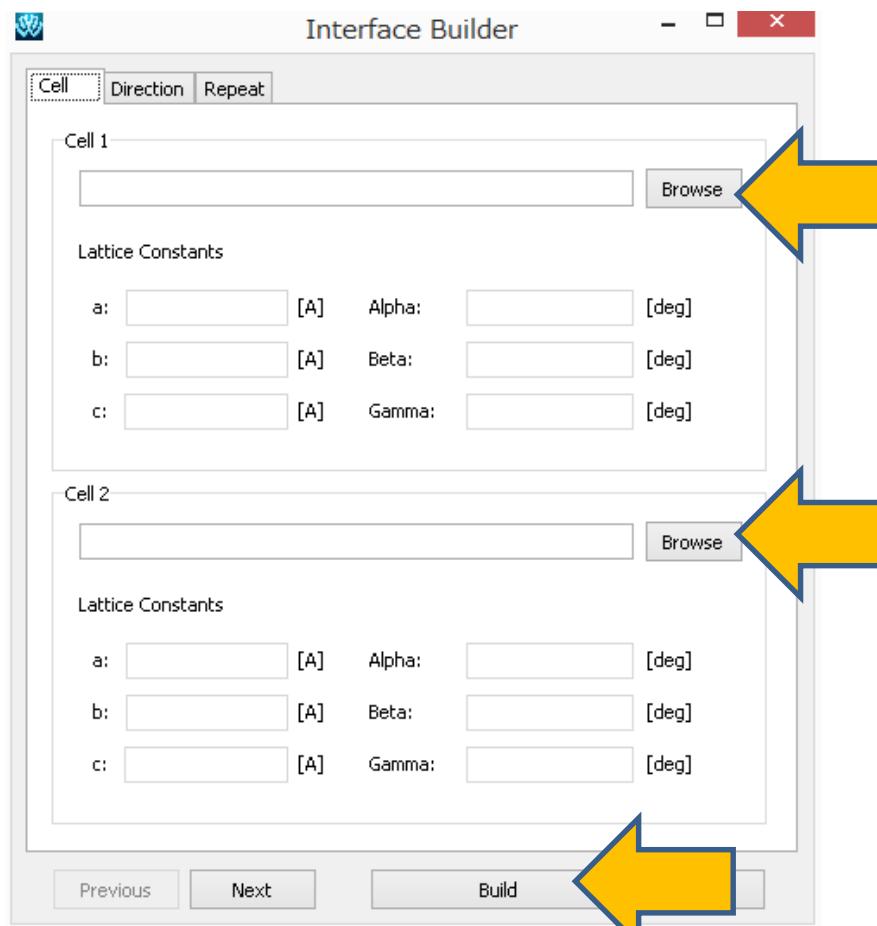
水が配置された系が表示される。[ファイル]-[名前を付けて保存]にて「water.mol2」として保存する(必ずmol2形式で)。次に[MD]-[界面ビルダ]を選択する。

```
Generated 750 H500O250 MASS=4,503.82 X=* Y=* Z=*
0-1-2-0 Leng=18.184 Ang=54.885 Dihed=*
Vol=125,373.8880 Rho=0.0597
```



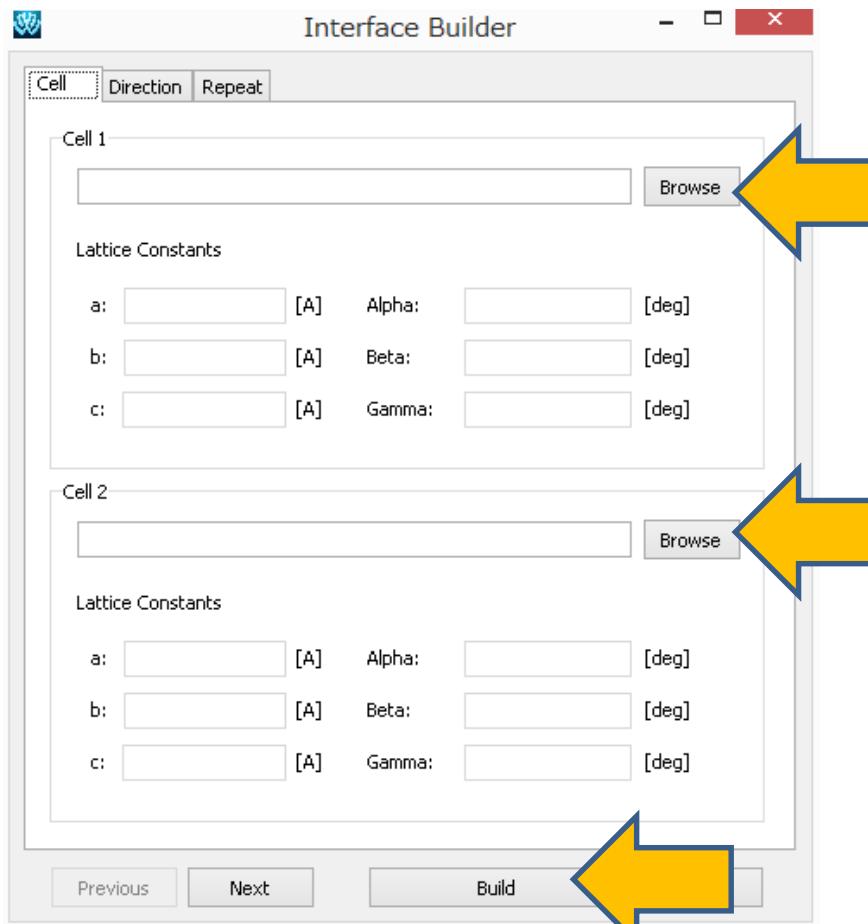
I. 系の作成

「Cell 1」の「Browse」ボタンまたはドラッグアンドドロップで「graphene.cif」を選択する。同様に「Cell 2」に「water.mol2」を選択し、「Build」ボタンを押し「graphene_water.mol2」として保存する。



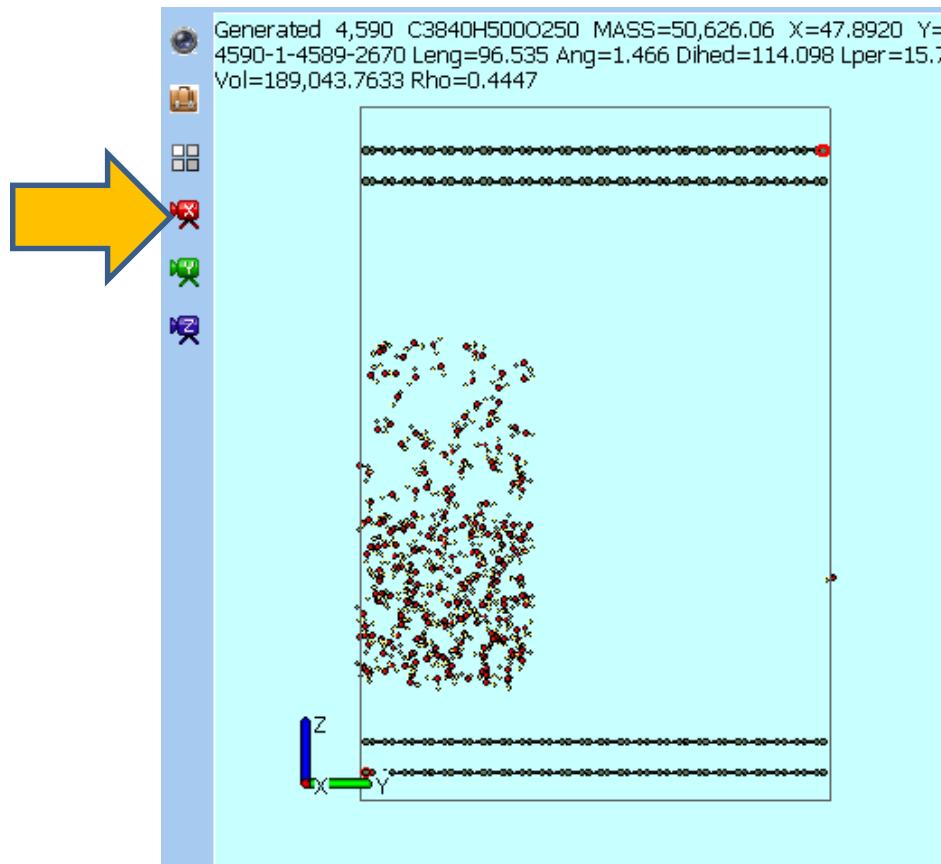
I. 系の作成

続けて界面ビルダにて、「Cell 1」に「graphene_water.mol2」、「Cell 2」に「graphene.cif」を選択し、「Build」ボタンを押し「gwg.mol2」として保存し、「Close」ボタンを押す。



I. 系の作成

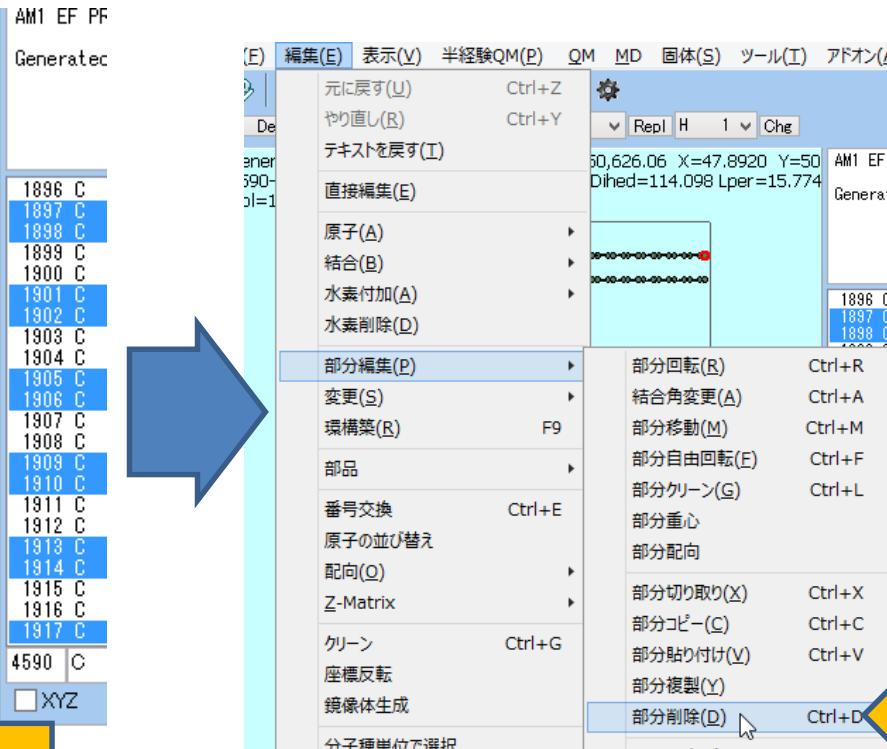
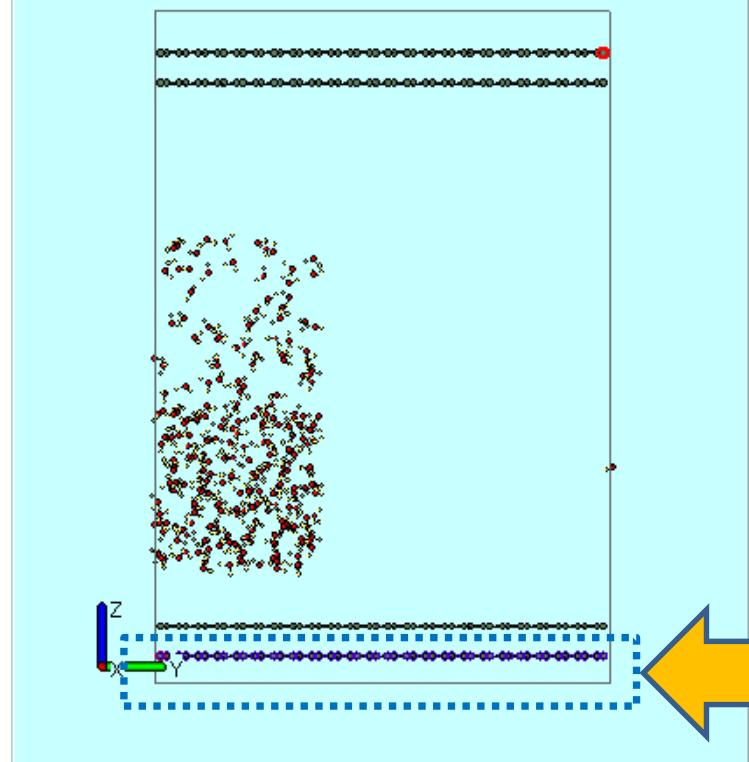
メイン画面で赤いカメラボタンをクリックし、カメラを遠ざけると、グラフェンに水の相が挟まれている様子が分かる。



I. 系の作成

Ctrl+ドラッグで、下のグラフェン2層のうち下の1層を選択する。次に、
[編集]-[部分編集]-[部分削除]を選択し、「Delete」ボタンをクリックする。

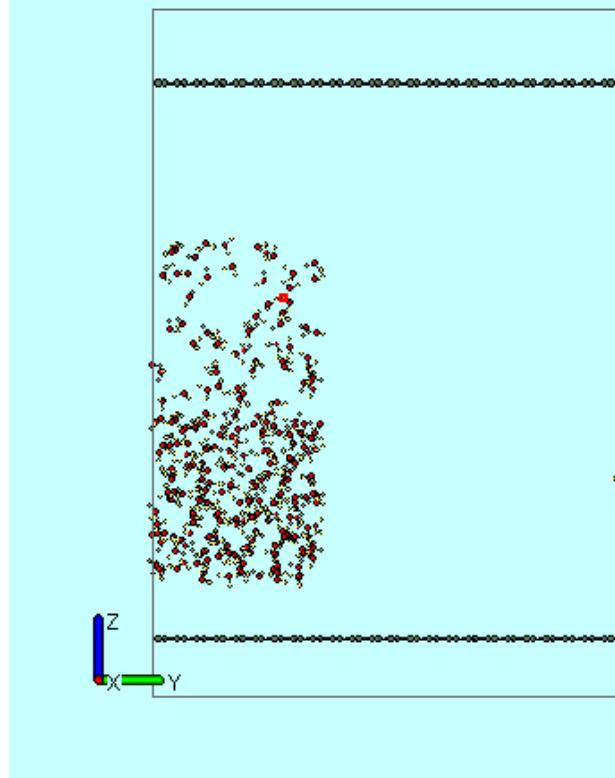
Generated 4,590 C3840H5000250 MASS=50,626.06 X=47.8920 Y=50
4590-1-4589-2670 Leng=96.535 Ang=1.466 Dihed=114.098 Lper=15.774
Vol=189,043.7633 Rho=0.4447



I. 系の作成

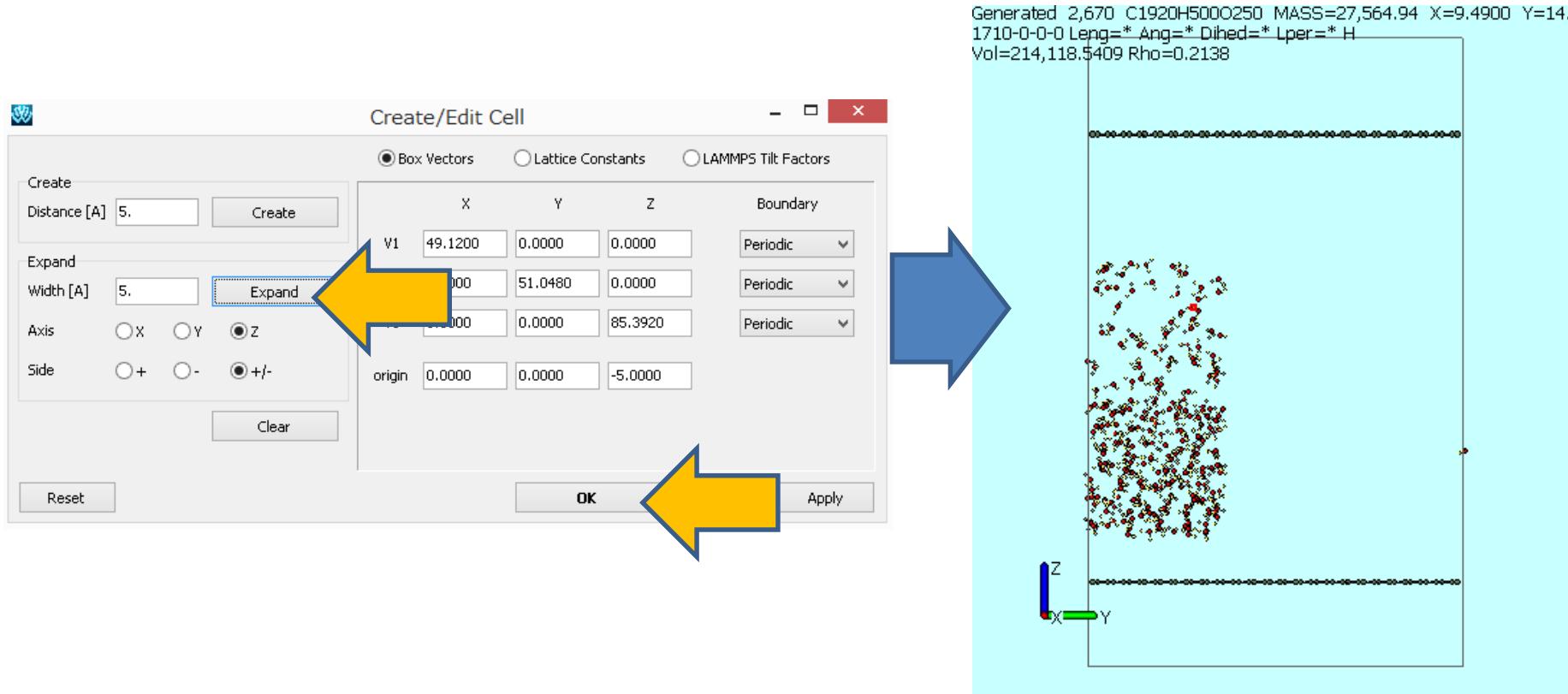
同様に上のグラフェン2層のうちの上の1層も削除すると下の左図のようになる。
次に、[編集]-[セルを作成/編集]を選択する。

```
Generated 2,670 C1920H5000250 MASS=27,564.94 X=9.4900 Y=14.4  
1710-0-0-0 Leng=* Ang=* Dihed=* Lper=* H  
Vol=189,043.7633 Rho=0.2421
```



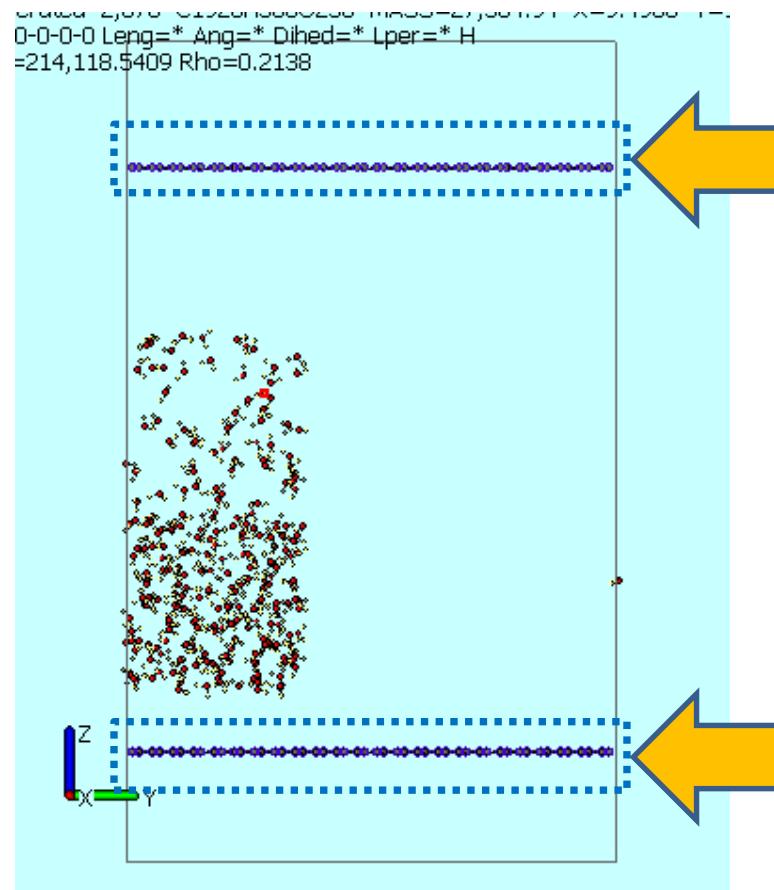
I. 系の作成

「Expand」ボタンをクリックし、「OK」ボタンをクリックする。



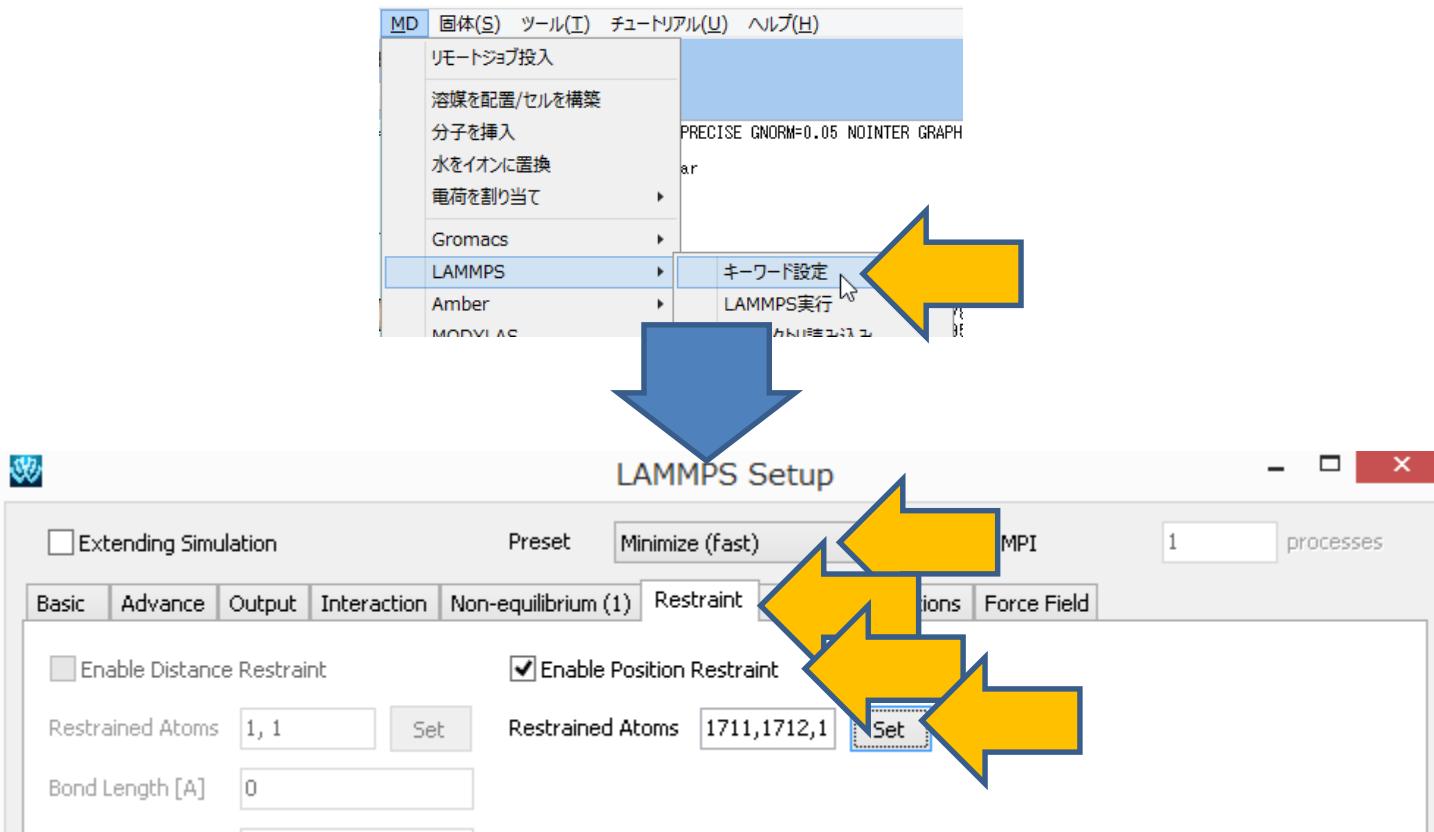
II. 平衡化計算

キーワード設定前に、メイン画面にて上下のグラフエンをどちらもCtrl+ドラッグで囲い青色で選択された状態にする。



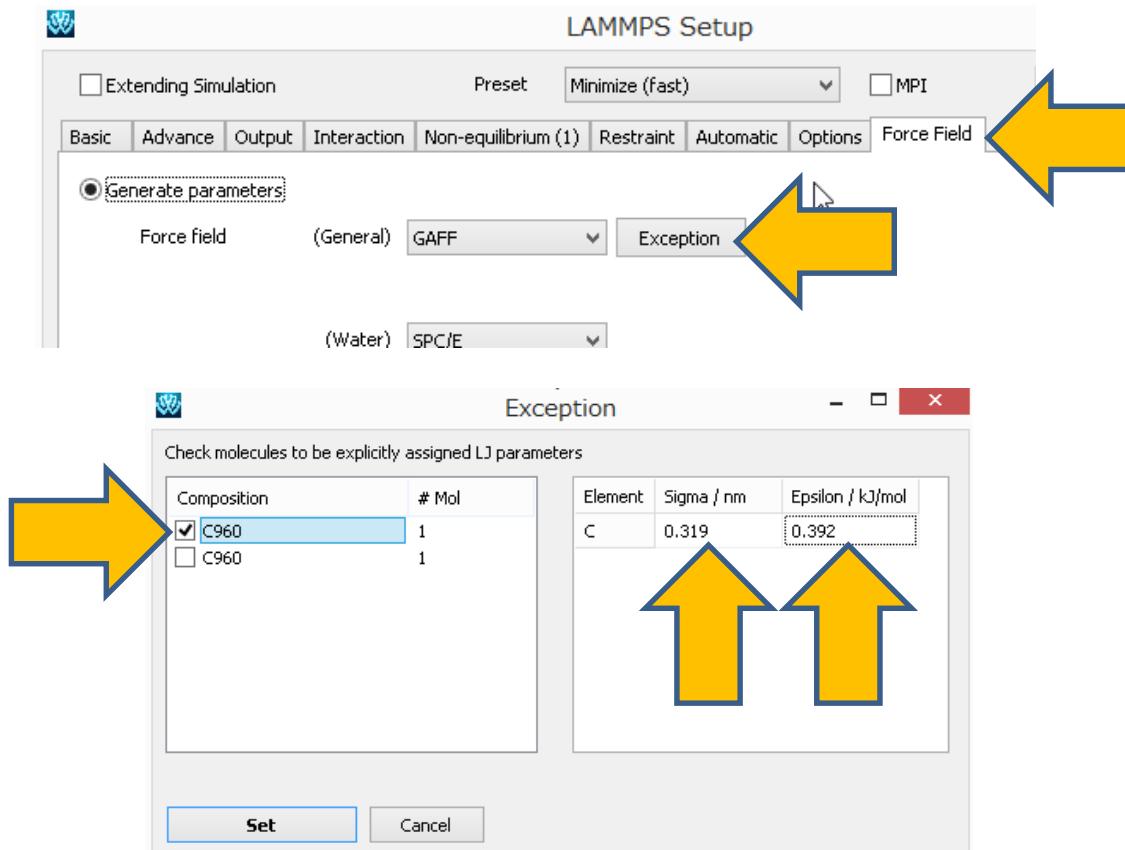
II. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックする。「Preset」に「Minimize (fast)」、「Restraint」タブの「Enable Position Restraint」にチェックを入れ、「Restrained Atoms」の「Set」ボタンをクリックする。



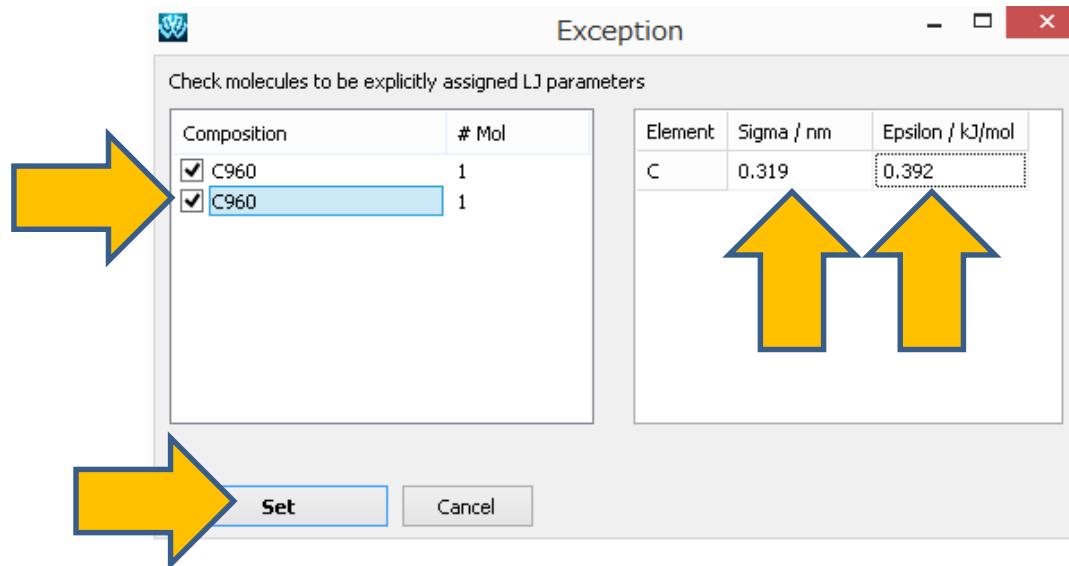
II. 平衡化計算

続けて「Force Field」タブの「Force field (general)」の「Exception」ボタンをクリックする。Exceptionウインドウの左側の1つ目の「C960」にチェックを入れ、右側の欄に「0.319」、「0.392」と入力する。(J. Phys. Chem. B, 107. 1345–1352, (2003).より)



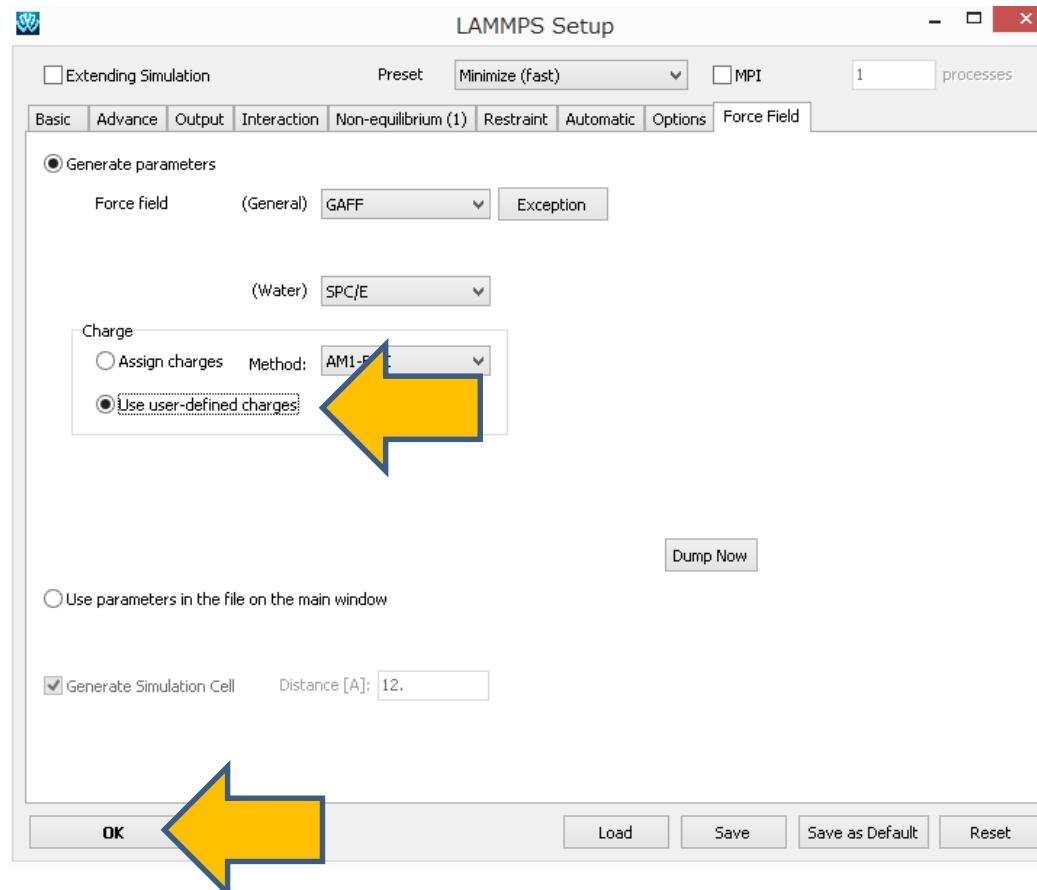
II. 平衡化計算

同様に2つ目の「C960」にチェックを入れ、右側の欄に「0.319」、「0.392」と入力し、「Set」ボタンをクリックする。



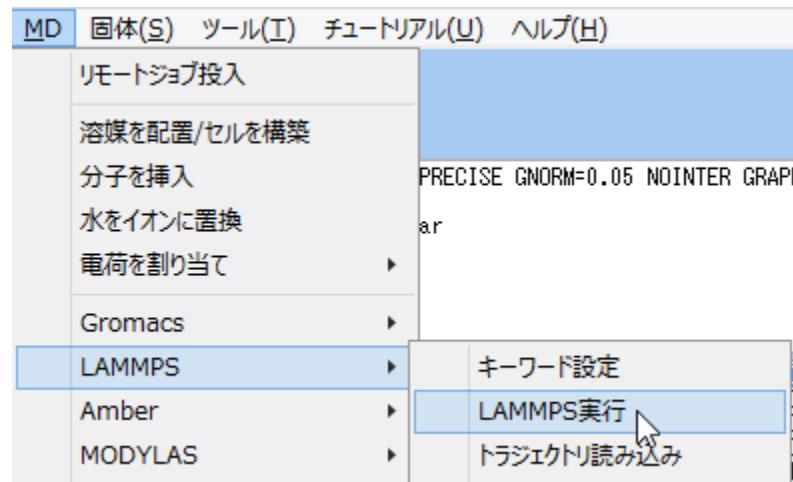
II. 平衡化計算

戻ってきた「LAMMPS Setup」ウインドウにおいて「Use user-defined charges」を選択し、「OK」ボタンを押す。



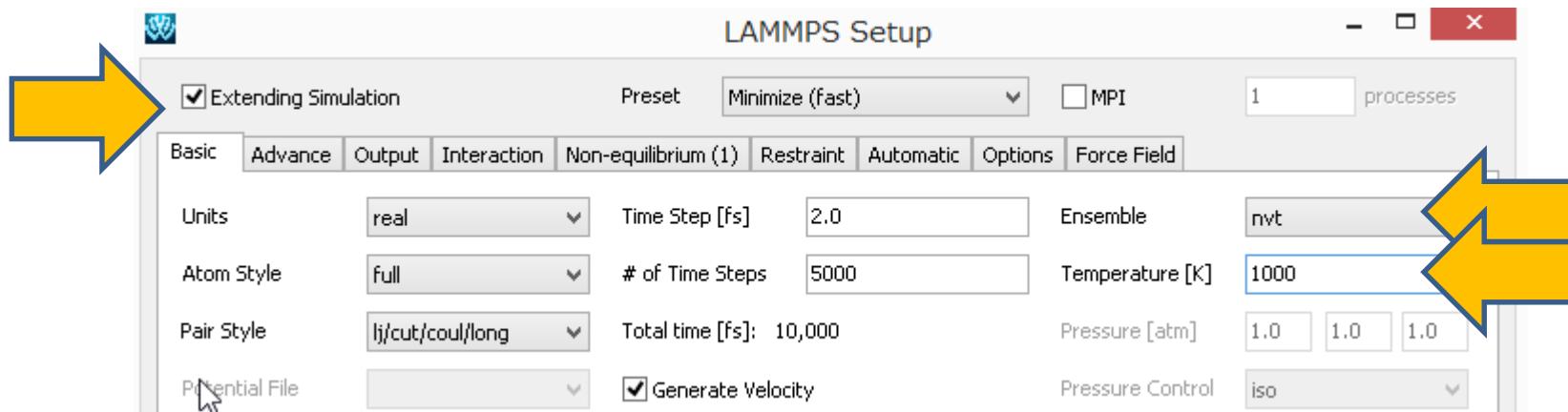
II. 平衡化計算

[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「gwg.data」とする。



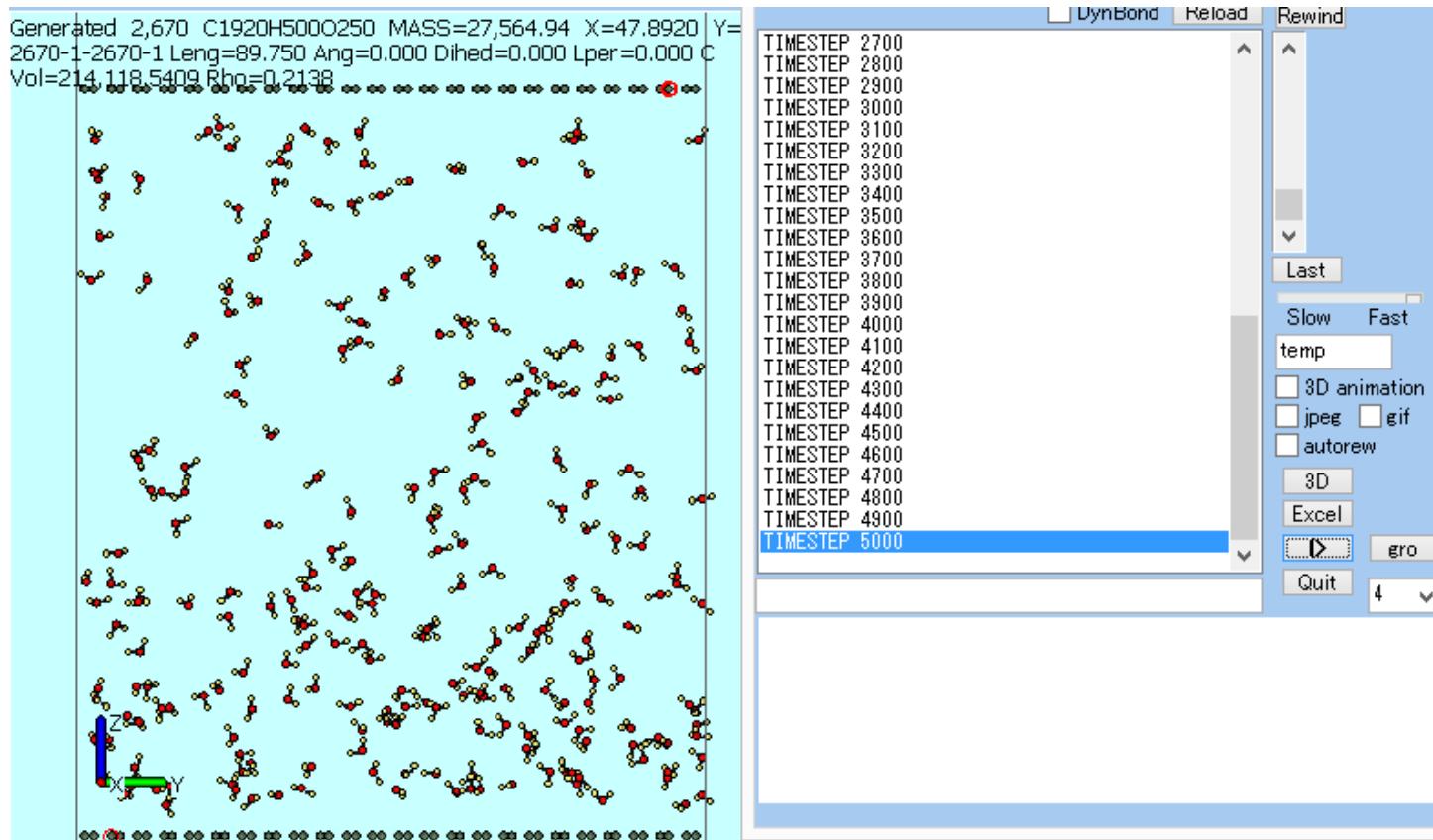
II. 平衡化計算

計算終了後再び[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックする。
「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Basic」タブの「Ensemble」に「nvt」を選択し、「Temperature」を「1000」として「OK」する。
そして、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



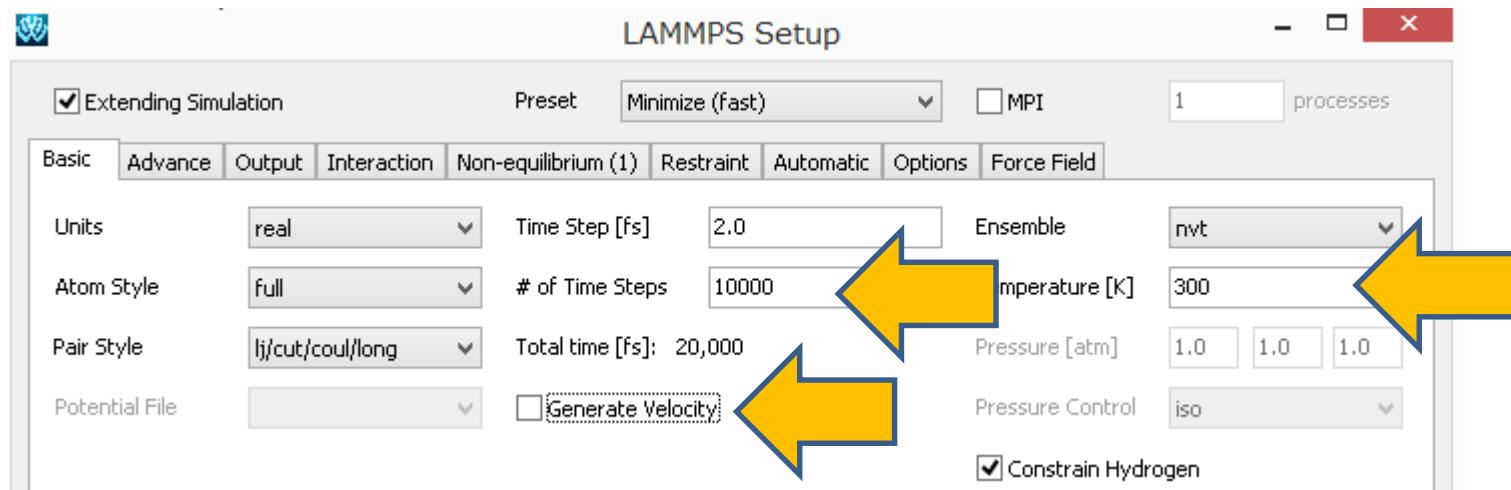
II. 平衡化計算

計算終了後、[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。メイン画面で赤色のカメラを選択し z 方向を縦にとる。超臨界状態の水がグラフェンの間でほぼ一様に広がる様子が分かる。



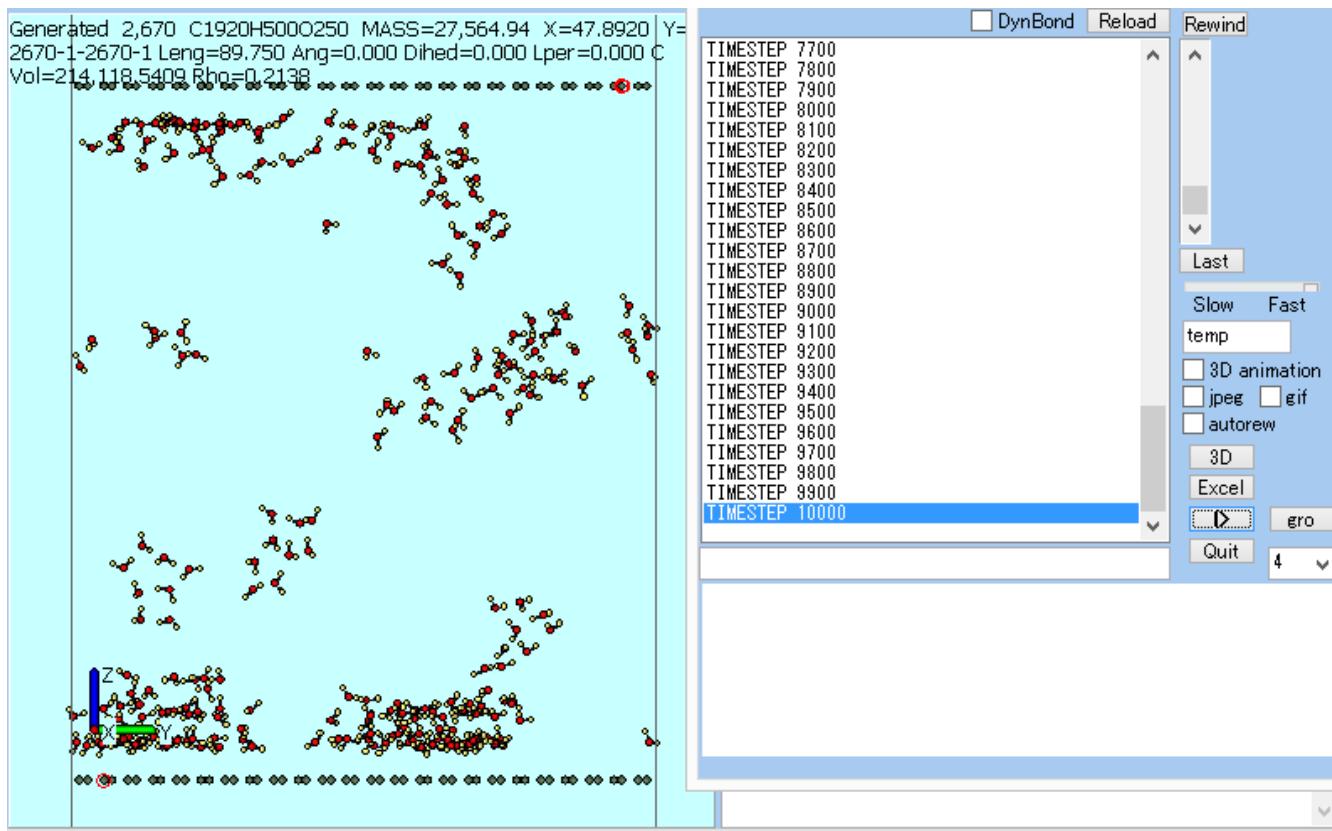
III. プロダクトラン

再び[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックする。
「# of Time Steps」を「10000」とし、「Generate Velocity」のチェックを外し、
「Temperature」を「300」として「OK」する。
そして、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



III. プロダクトラン

計算終了後、[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。メイン画面で赤色のカメラを選択しz方向を縦にとる。冷却により水分子は凝集し、一部はグラフェンに吸着している様子が分かる。



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 >

X-Ability Co.,Ltd. 11月14日 20:30
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...

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