

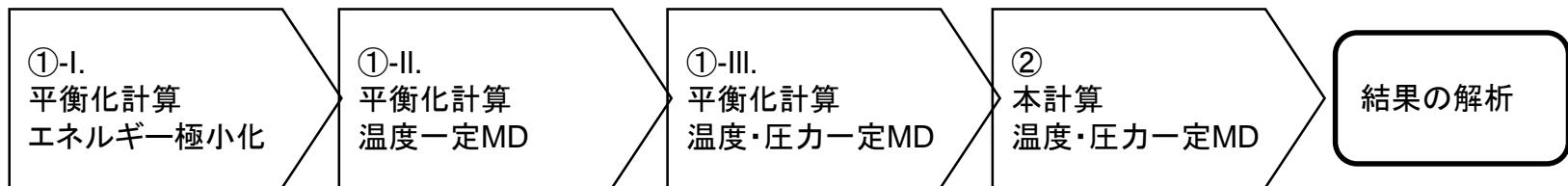
Winmostar チュートリアル
LAMMPS
基礎編
v8.000

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/10/01

概要

- 常温常圧の水について、系の作成と平衡化計算と本計算を実行し、基礎的な結果解析を行います。



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。
- “本計算”のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を得することができます。
- 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。

動作環境設定

- 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_wmをセットアップする。

https://winmostar.com/jp/manual_jp.html



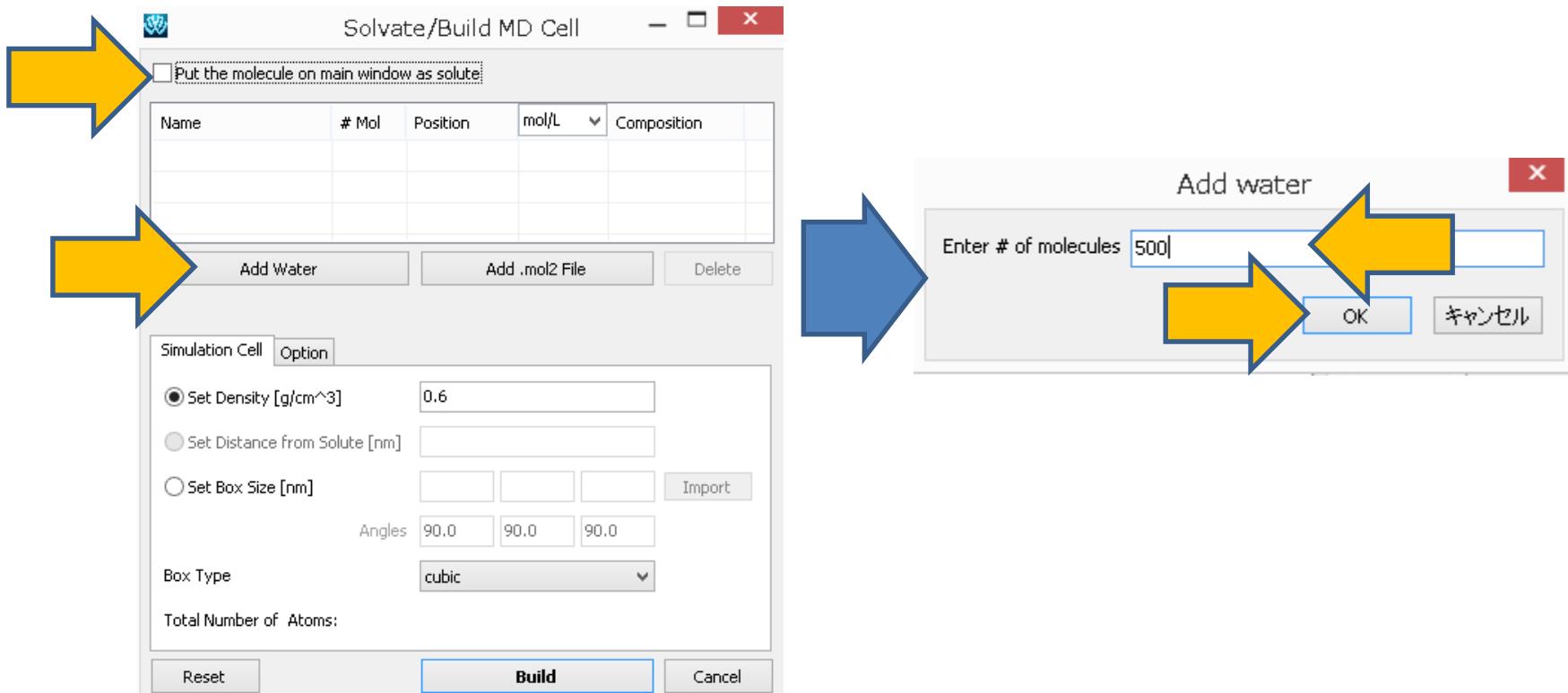
- LAMMPSとCygwinは、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. 系の作成

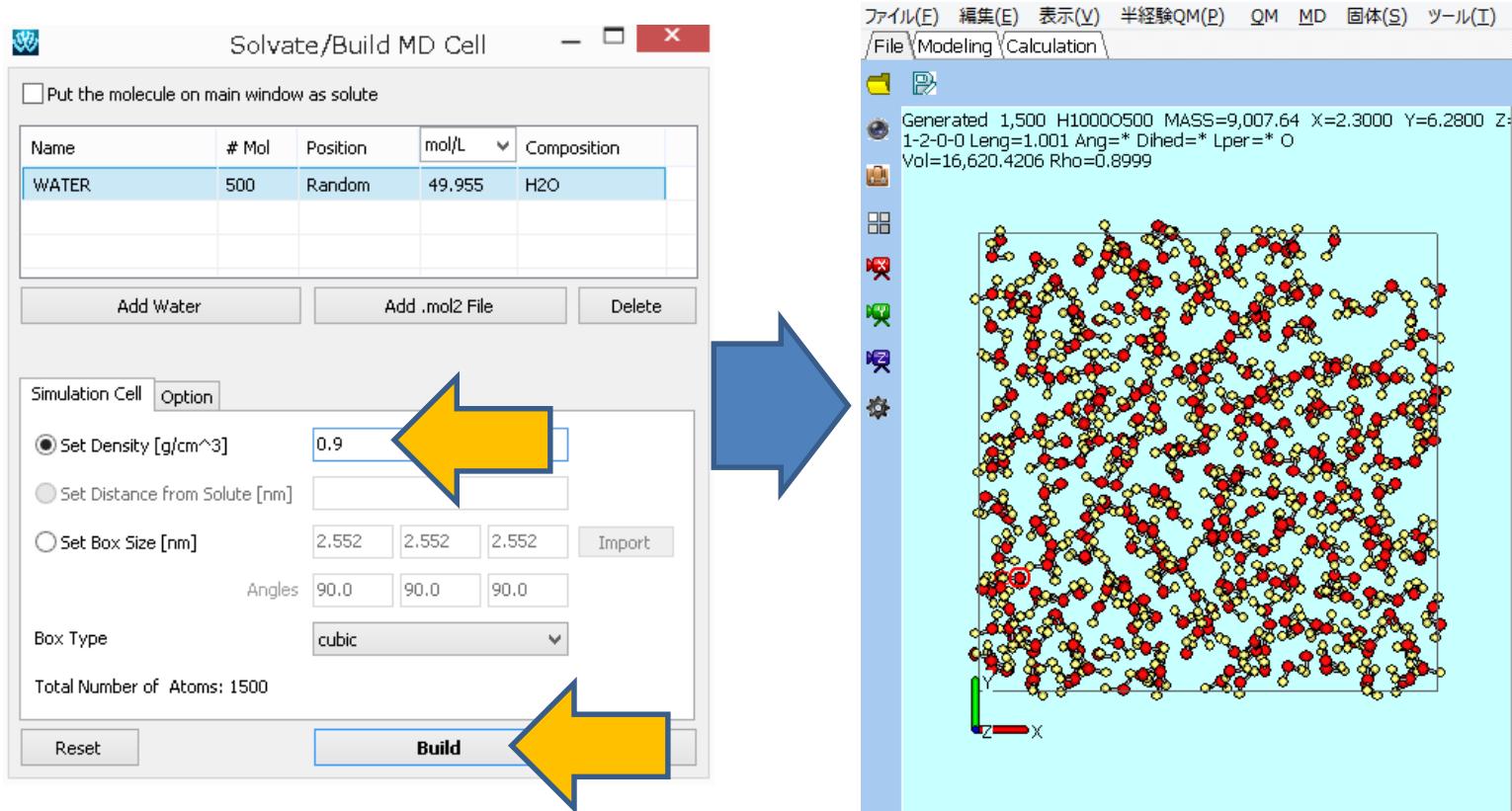
まず[MD]>[溶媒を配置/セルを作成]をクリックする。

[Put the molecule on main window as solute]のチェックを外し、[Add water]ボタンをクリックする。[Enter # of molecules]に「500」と入力し[OK]をクリックする。



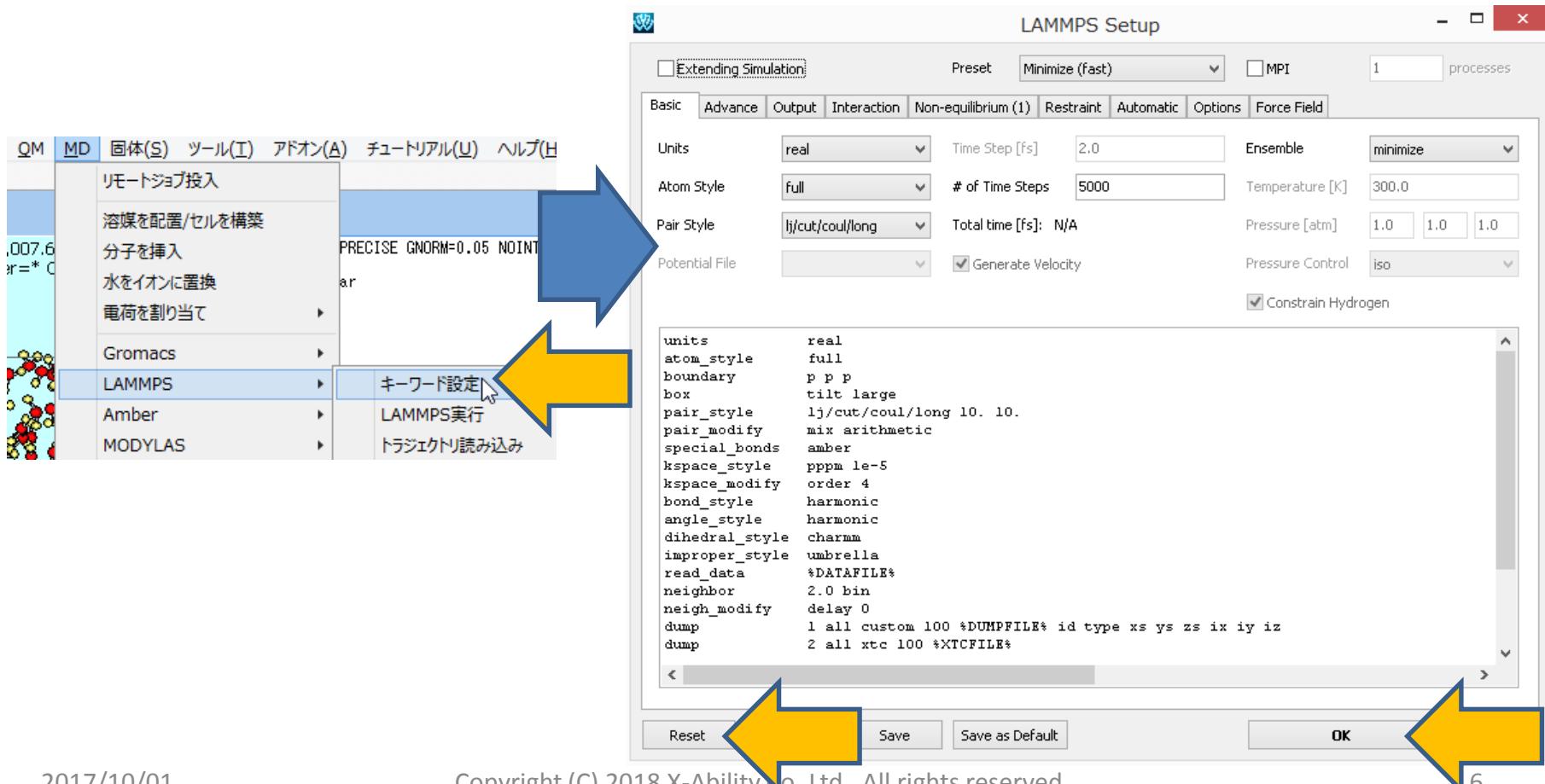
I. 系の作成

「Set Density」に「0.9」と入力し、「Build」をクリックすると左図のような系が作成される。



II. 平衡化(エネルギー極小化)

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。Winmostar起動後キーワードが変更されている場合は「Reset」ボタンを押す。その後「OK」ボタンを押す。



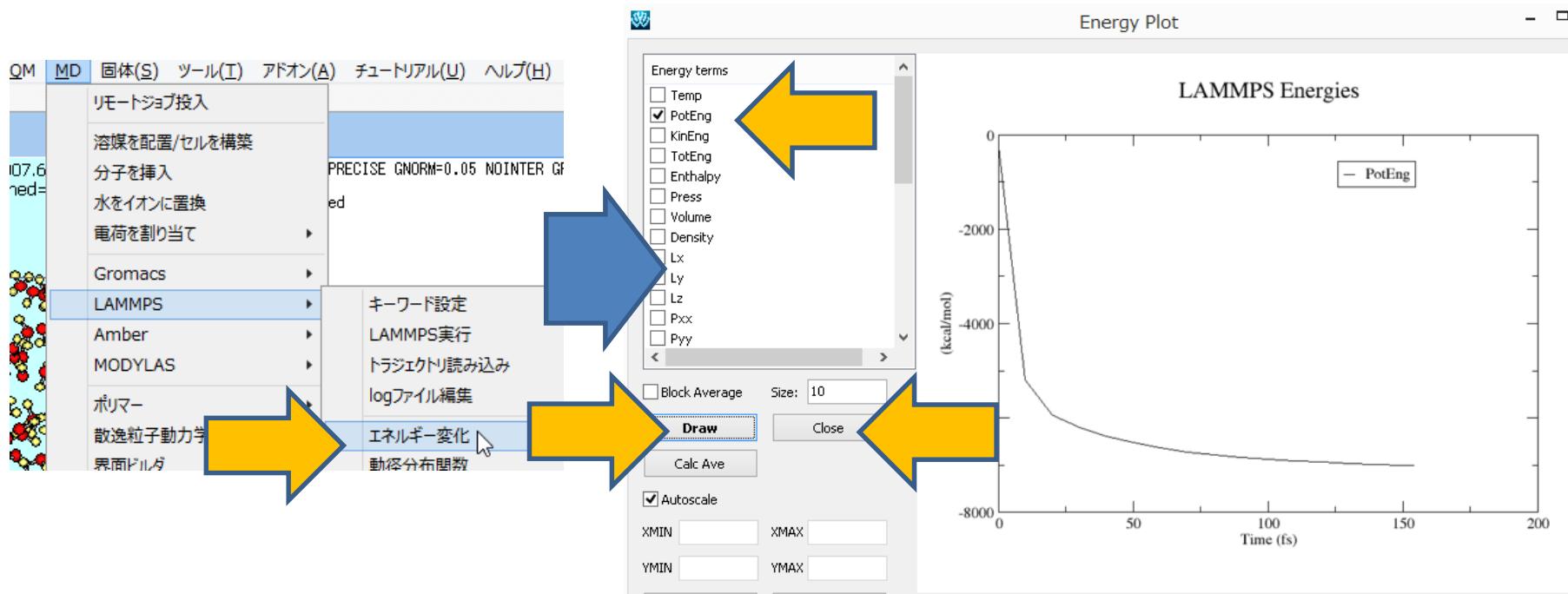
II. 平衡化(エネルギー極小化)

「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。座標ファイル(拡張子: data)の保存場所を聞かれるので、ファイル名を入力して保存する。
その後、Winmostar Job Managerが立ち上がり、LAMMPSが実行される。



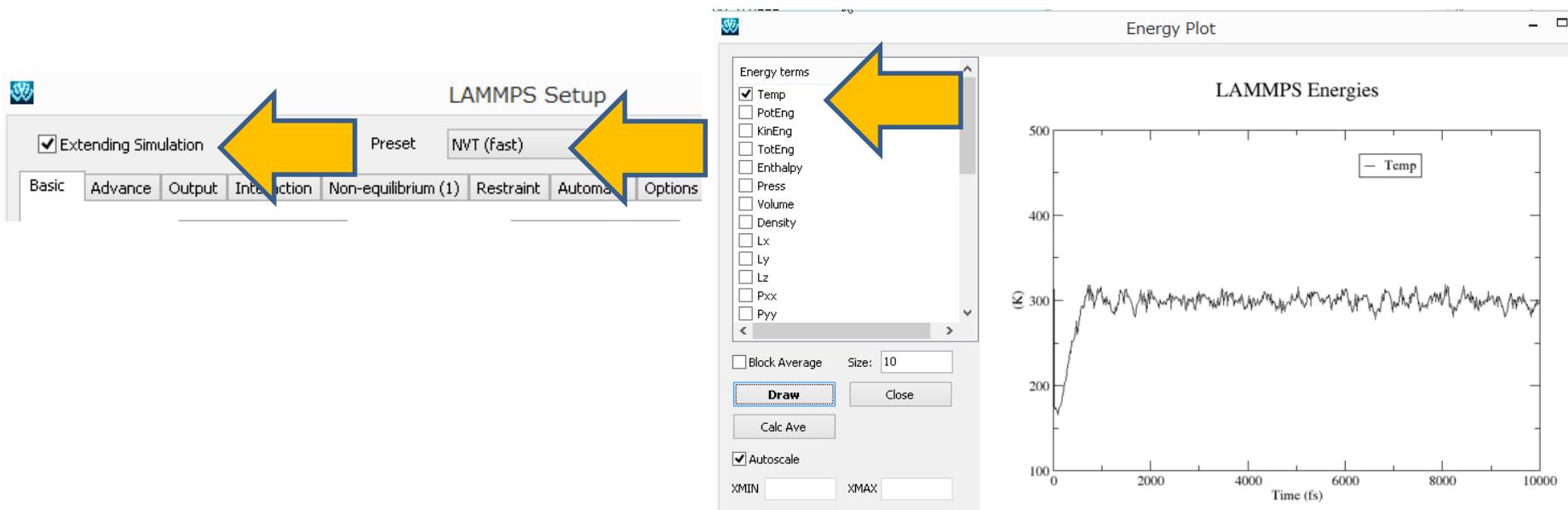
II. 平衡化(エネルギー極小化)

「MD>LAMMPS>エネルギー変化」を選択する。デフォルトで選択されるエネルギー(log)ファイルを開く。「Energy Term」で「PotEng」にチェックを入れ「Draw」ボタンを押し、ポテンシャルエネルギーの変化を確認する。確認後「Close」ボタンを押す。



II. 平衡化(温度一定)

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Preset」に「NVT (fast)」を指定し「OK」を押す。
その後、「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。
計算終了後「MD>LAMMPS>エネルギー変化」にて「Temperature」を選択して「Draw」し、温度の変化を確認し「Close」する。

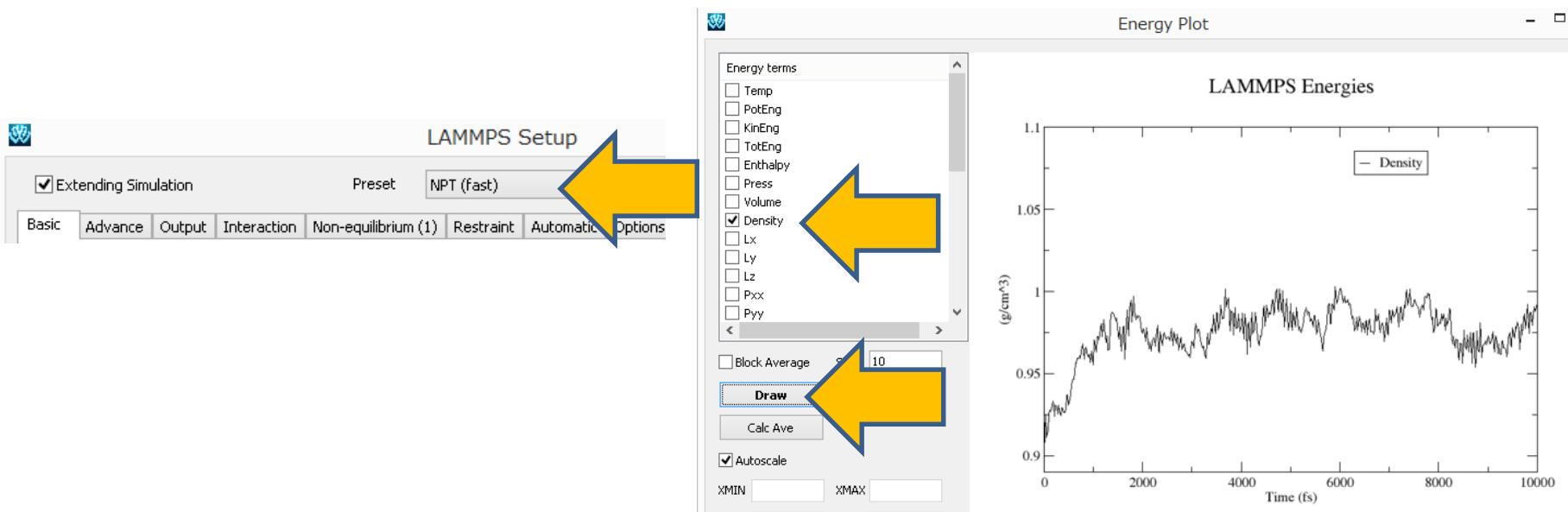


II. 平衡化(温度・圧力一定)

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。「Preset」に「NPT (fast)」を指定し「OK」を押す。

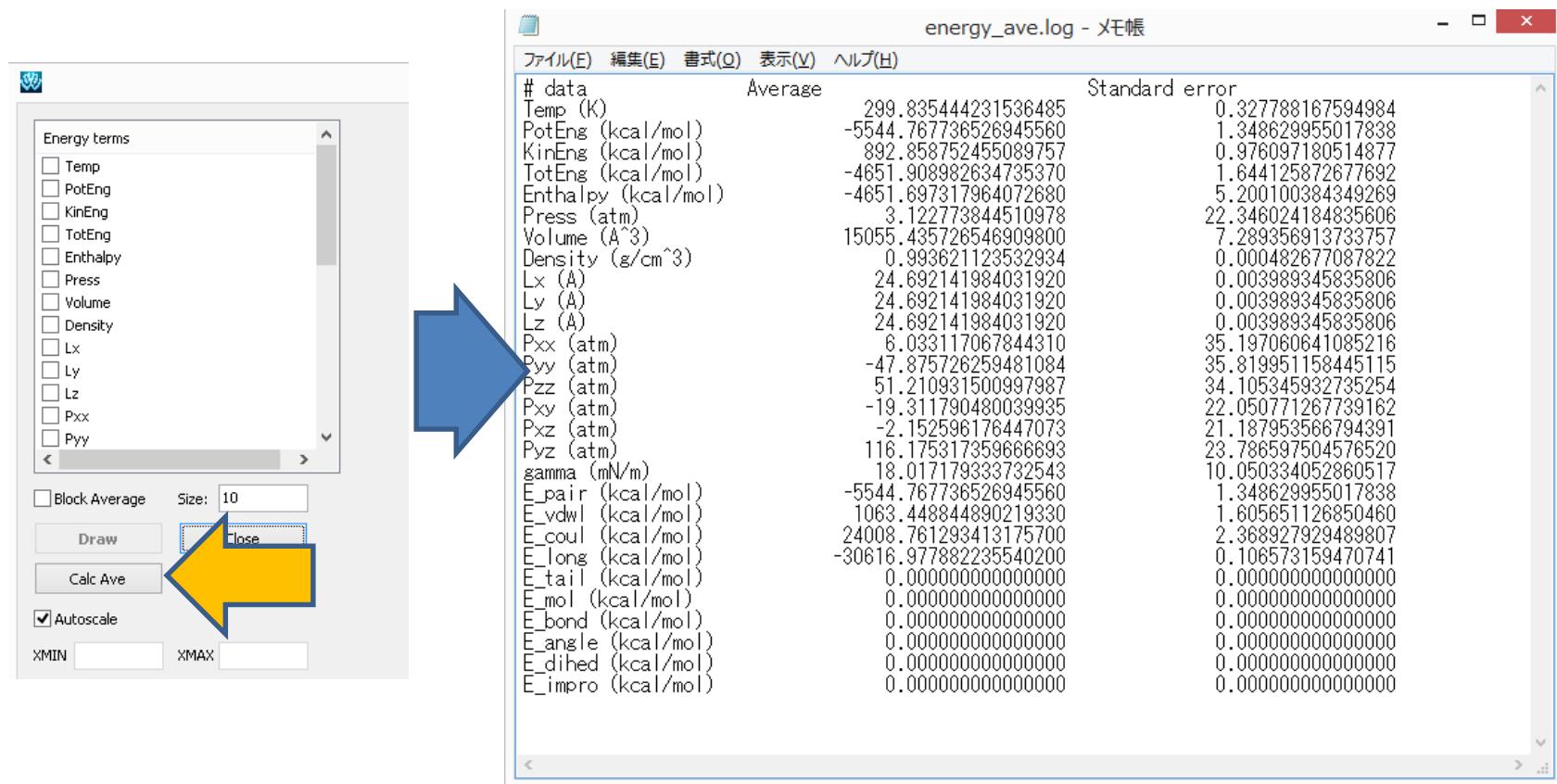
その後、「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。

計算終了後「MD>LAMMPS>エネルギー変化」にて「Density」を選択して「Draw」し、密度の変化を確認し「Close」する。



III. 本計算

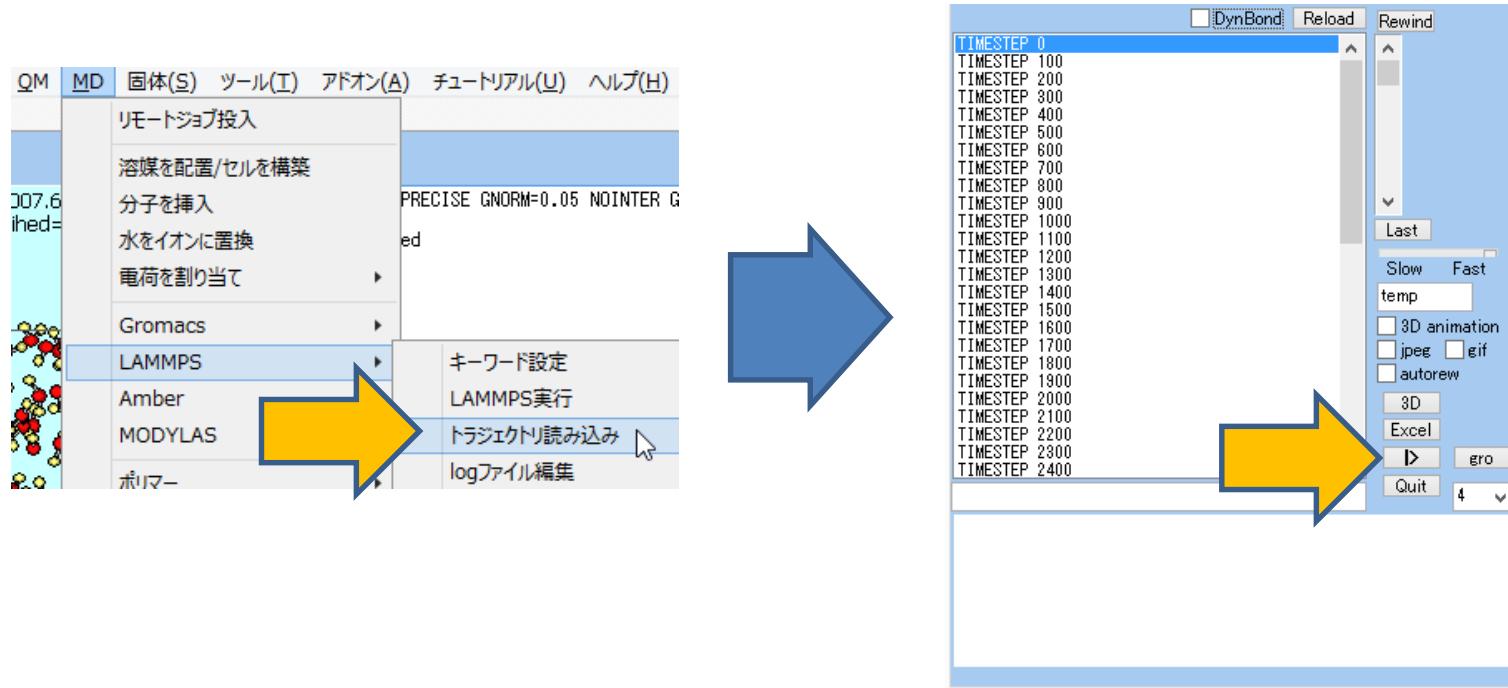
同じキーワードのまま「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。
 計算終了後「MD>LAMMPS>エネルギー変化」にて「Calc Ave」ボタンをクリックし、
 デフォルトで選択される座標ファイルを選択すると各種統計量の平均が表示される。



IV. 結果の解析

①アニメーションの表示

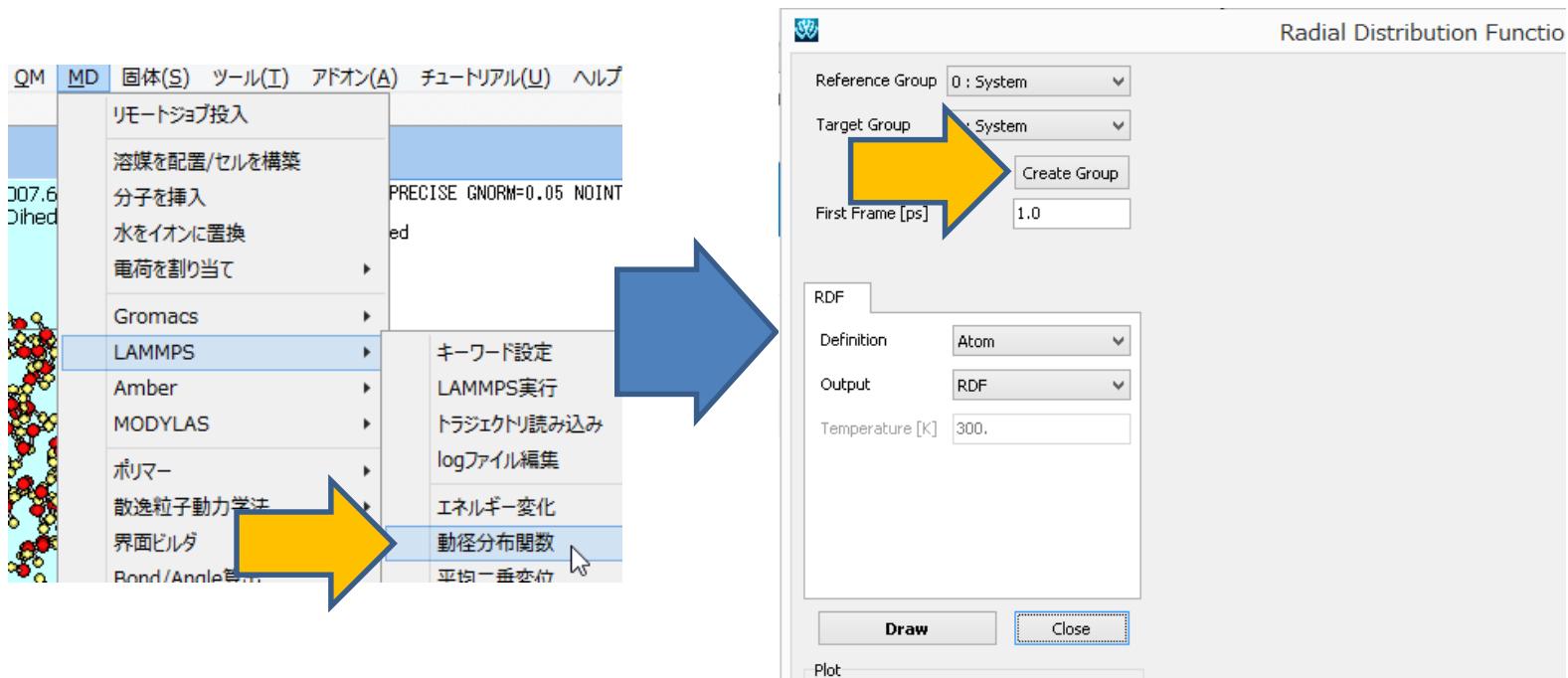
- 「MD>LAMMPS>トラジェクトリ読み込み」を選択する。対象となる座標ファイル(拡張子: data)とトラジェクトリファイル(拡張子: dump)をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- アニメーション操作ウインドウ(右図)が開く。再生ボタンを押すとアニメーションが表示される。



IV. 結果の解析

②動径分布関数

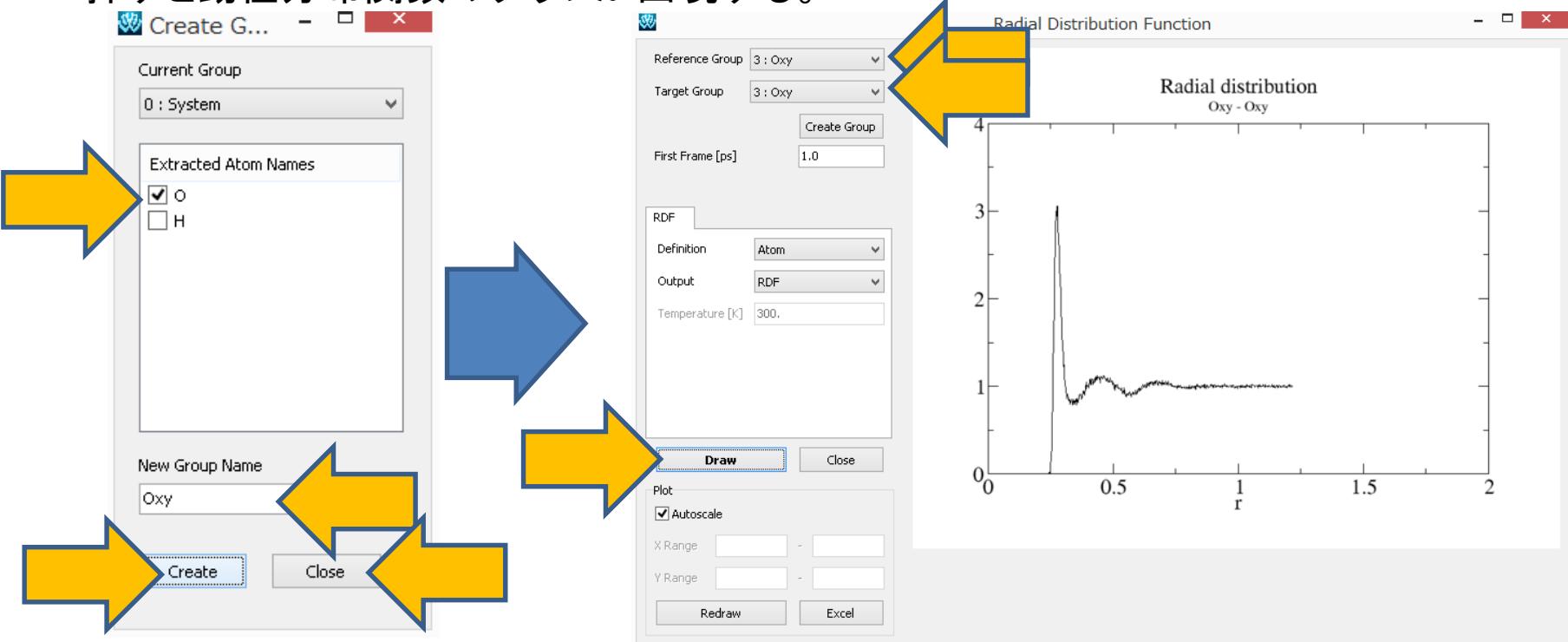
- 「MD>LAMMPS>動径分布関数」を選択する。対象となるトラジェクトリファイル（拡張子: xtc）、座標ファイル（拡張子: gro）、インデックスファイル（拡張子: idx）をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- 「Create Group」ボタンを押し、デフォルトで選ばれるgroファイルを開く。



IV. 結果の解析

②動径分布関数

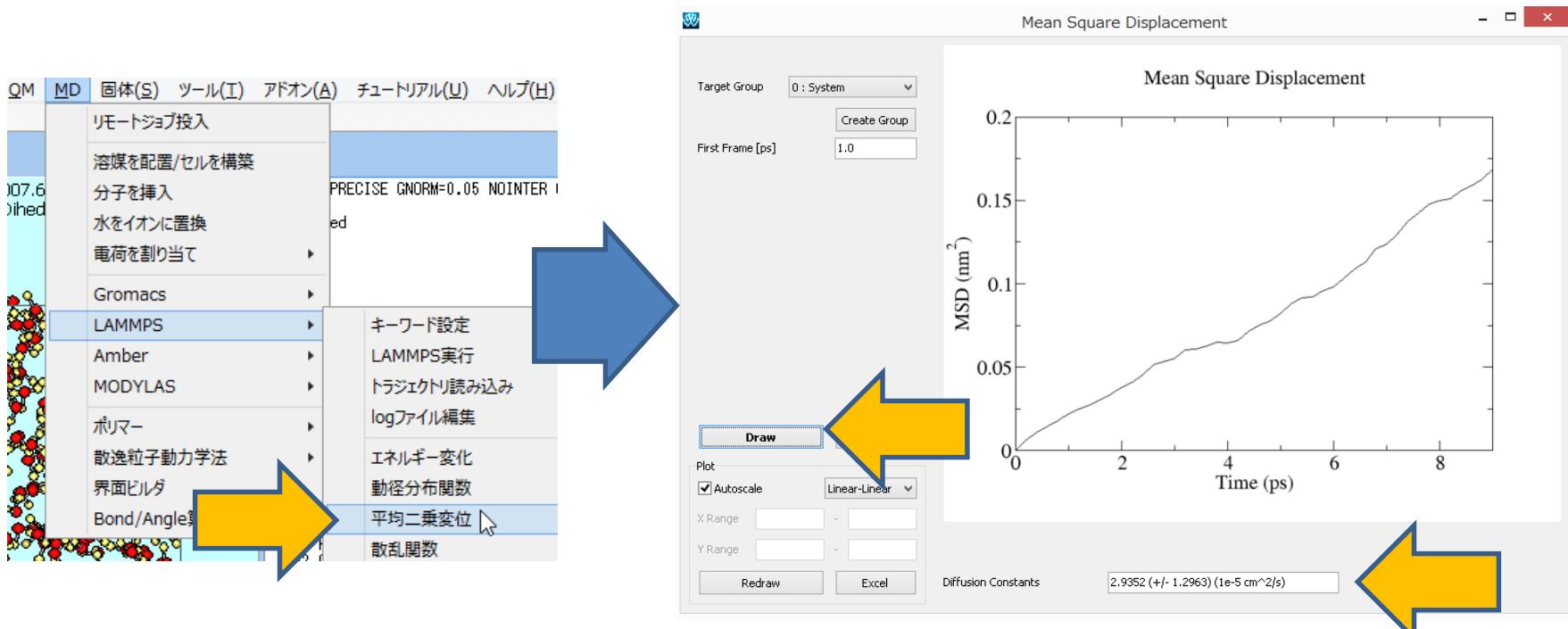
「Extracted Atom Names」の「O」にチェックを入れ、「New Group Name」に「Oxy」と入力し「Create」ボタンを押す。その後「Close」ボタンを押し、「Radial Distribution Function」ウインドウにて「Reference Group」と「Target Group」に「Oxy」を選択し「Draw」ボタンを押すと動径分布関数のグラフが出現する。



IV. 結果の解析

③自己拡散係数

- 「MD>LAMMPS>平均二乗変位」を選択する。対象となるトラジェクトリファイル(拡張子: xtc)、座標ファイル(拡張子: gro)、インデックスファイル(拡張子: ndx)をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- 「Draw」ボタンを押すと平均二乗変位のグラフが表示され、その下に自己拡散係数が表示される。



The screenshot shows the Facebook profile of X-Ability Co.,Ltd. The profile picture is the company logo, and the name is "X-Ability Co.,Ltd. コンピュータ・テクノロジー". The cover photo features a thumbs-up icon and the text "いいね！". The timeline shows a post from November 14, 2013, at 20:30. The post content is:
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...

The post includes a graphic of a molecular structure with various atoms and orbitals, labeled "山口 達明". Below the post are links to the book's Amazon page: "フロンティアオービタルによる新有機化学教程" and "フロンティアオービタルによる新有機化学教程 AMAZON.CO.JP".